新装版 現代物理学の基礎 3

量子力学 I

湯川秀樹
並木美喜雄
江沢 洋
豊田利幸
高木修二
田中 正
位田正邦

岩波書店

新装版　現代物理学の基礎 3

量子力学 I

湯川秀樹
並木美喜雄
江沢　洋
豊田利幸
高木修二
田中　正
位田正邦

岩波書店

新装版　現代物理学の基礎 について

本シリーズは，1978 年に刊行した岩波講座「現代物理学の基礎」〔第 2 版〕(全 11 巻)を単行本化したものです．装丁を新たにしましたが，内容は講座刊行時のものと基本的に同一です．

第2版への序

本講座の初版においては『量子力学』は“初版への序”の通り全3巻の構成をもって編集されていたが，今回第2版の刊行を行うにあたって全2巻構成とし，『量子力学I』は新たなる執筆をもって編成することとした．

すなわち，第I部“歴史的序論”において，まず古典物理学から量子力学への歴史的発展を包括的に論じ，以下の各部ではそれをうけて，量子力学の内容および構造そのものの解明に進むことにした．その順序は次の通りである．第II部“量子力学の構成”においては，粒子と波動の二重性に新しい光をあて，波動力学の再構築が行われ，ついで行列力学と統合した形での量子力学の基礎体系が呈示される．後者は『量子力学II』においてさらに精密な数学的枠組として展開される．

量子力学はもとより微視的世界の統一的把握を目的に発展してきたものであって，その論理的構造は自然そのものの構造とわかち難く結びついている．第III部では，第II部でえられた基礎体系を簡単な力学系の解明に適用することを通じ，さらに量子力学における重要ないくつかの概念あるいは方法が述べられる．

量子力学における場の概念の基礎的重要性にかんがみ，本巻の最後に第IV部として多粒子系の扱いと場の量子論の基礎を論じ，さらにやや特論的性格をもつ“拘束のある系に対する正準理論”をおさめた．

なおこれに続く第4巻『量子力学II』は，第V部で散乱理論を斬新な形式で解説し，第VI部で量子力学の数学的構造を物理の問題として考察し，第VII部で測定過程と情報の問題を論じ，最後の第VIII部で量子力学出現以後の物理学的世界像を描く．これは初版『量子力学II, III』の第IV, V, VI, VII部に一部変更を加えて再編成したものである．そのために初版の各部との対応にずれが生じていることをお断りしておく．

上記のような再構成に当っては，全執筆者が綿密な打合せを行い，構成上の完

全を期したが，最終的な責任が編者である湯川，豊田にあることはいうまでもない．

1977年10月

湯 川 秀 樹
豊 田 利 幸

初版への序

1972年という時点における現代物理学なるものは，きわめて複雑な構造をもつように見える．その生長しつつあるいくつもの尖端に次つぎと焦点を当てていったとしても，全貌を捕えることにはならない．それどころか，局部の観察に努力を集中すると，その部分が全体に対してもつ意味が見失われるという相反的な状況に，容易に追いこまれてしまうのである．その典型的な例として，素粒子論の現状をあげることができよう．同じく素粒子の理論的研究といっても，それがいかにも現代的だと見えるような場合ほど，抽象化の過度の進行が目だつ．新しく獲得された一群の実験データとのよりよい一致によって，その正当性を主張しえたとしても，それが素粒子の全体像をより明確にする上において，したがって，ひいては自然認識をより深くする上において，どのような意味をもつかは，ほとんど全くわからない場合があまりにも多いのである．素粒子論以外の分野の生長の尖端部については，事態はそれほど極端ではないかも知れないが，しかし，どの部分をとっても，それが現代物理学の全体像の中でどのような地位を占めるかを明確にすることは，一般に容易ではないのである．

こういう状況を 50 年前と比較して見ると，いちじるしく違っている反面において，次のような類似点がすぐ目につく．当時の尖端部分の中で今日の素粒子論に対応するのは，原子構造論であった．原子スペクトルに関する実験データは急速に蓄積されつつあり，その分析によって得られた経験的諸法則の中には，Planck-Bohr の段階での量子論——いわゆる前期量子論——によって基礎づけられるものがいくつもあった．それゆえ，当時の多くの物理学者にとって，Newton 力学と Maxwell-Lorentz の電気力学を 2 本の柱とする古典物理学は，前期量子論と Einstein の相対論とによる大きな修正を加えることによって，マクロの世界のみならず，ミクロの世界の諸現象をも定量的に説明する可能性をもつという，楽観的であると同時に保守的な考え方が正しいように見えたのである．実際，彼らにとって物理学の姿は——例えば Planck の 5 巻本の理論物理学の内

容が示すように――あたかも古典物理学を根幹とする比較的単純な構造の巨木であるかの如く，脳裡に思い浮かべられたでもあろう．

ところがそれから数年ならずして，量子力学の出現によって状況は一変した．もちろん量子力学は，直接的には前期量子論を母胎として生まれてきたものであり，前期量子論なるものが，すでに古典物理学から――相対論の場合より以上に――突然変異的に発生したものであった．ただ量子力学の場合は，昆虫の変態にも比すべき大きな変化であり，影響するところも非常に広範であった．一言にしていえば，自然認識の新しい段階に移行したという性格がきわだっていた．この段階に立つことによって，いろいろな方向に向って展望が大きく開けてきた．それと同時に，相対論をも含めての古典物理学的世界像が，新しい世界像で置きかえられなければならなくなったのであった．

それ以後，今日までの半世紀たらずの間に，物理学の姿は急速に変化し続けてきた．そして現役の物理学者の大多数にとって，ましてや新たに物理学を学ぼうとする人びとにとって，古典力学や古典電気力学などよりも，むしろ量子力学こそが出発点と見なされるようになったのである．そういう状況の変化に対応して，この講座でも古典物理学を第1巻と第2巻に収約し，量子力学を第3巻，第4巻，第5巻にわたって，いろいろな角度からやや不釣合なくらい詳しく叙述することにした．

すなわち第3巻では，第1巻，第2巻の相対論を含む古典物理学を前提として，第I部で前期量子論の出現から量子力学の成立に到る過程をたどりながら，数学的表現のもつ物理的意味を明確化することに努めた．第II部の前半では量子力学がミクロの諸現象をいかに美事に説明しうるかを，簡単な例をあげて具体的に示した．後半では輻射場の量子化から一般の場の量子論へと進んでゆく道筋を示したが，ここでは無限大の自由度をもつ系への量子力学の拡張が行なわれるわけで，その際，ほとんど不可避的に発散の困難に遭遇する．それは相対論的な考察が同時に必要になってくることと深く結びついている．発散の困難が残るということは，量子力学がこの方向に向っては，未完成の開かれた理論体系であることを意味している．この方向をさらにたどってゆけば，相対論の諸要請を完全に満足するように量子電気力学を定式化するという課題や，中間子論から始まる素粒子の一般的な理論の形成の問題へと入ってゆくことになるが，それらは全て第11

巻の『素粒子論』に譲ることにした．

第4巻の第Ⅲ部では，量子力学系の性質を対称性の考察から前巻第Ⅱ部よりも一般的に捕え，また複雑な系のもちうる近似的な諸性質を明らかにした．そして最後に電子に対する相対論的な理論をやや詳細に論じたが，ここでも非相対論的な量子力学にはなかったいろいろな新しい問題が発生し，その先は，やはり第11巻の『素粒子論』に続くことになる．第Ⅳ部は比較的に新しい形の散乱理論を内容としているが，それは最近20年ほどの間の物性論や素粒子論の近代化と離すことのできない関係にある．

第5巻の第Ⅴ部では，量子力学の一般的な数学的構造が考察の対象になっている．ここでも無限自由度の問題が登場する．第Ⅵ部では，20世紀後半になって，工学・数学・生物学で急に大きな役割を演じはじめた情報概念を，物理学の側から見直そうとする試みの一環として，量子力学の立場から情報の問題を取りあげたわけである．これは従来の量子力学の教科書にはない新しい特色の1つといえるであろう．最後の第Ⅶ部は量子力学的世界像と題されているが，古典物理学の場合のようなまとまった明確な世界像を描きだすことが困難なのが，実は量子力学出現以後の，私たち物理学者の悩みでもある．というよりも，むしろどの1つの単純な考え方も，それだけを貫徹さすことができないことを，量子力学は私たちに教えたというべきであろう．量子力学自身が自己完結的でなく，いろいろな方向に，違った意味で開かれていることを，もういちどこの第Ⅶ部で強調すると同時に，その彼方から将来どんな，より基礎的な理論が生まれでるにせよ，量子力学の出現によって余儀なくされた物理学者の考え方の大きな転換は，もはや逆戻しがきかないであろうことをも示唆したいのである．

1972年2月

湯川秀樹

目　次

第I部　歴史的序論

第1章　古典物理学から量子力学へ

§1.1　古典力学的段階における原子論

本講座の第1巻と第2巻を占める『古典物理学』では，それは現代物理学以前に成立していた理論体系および，それによって充分に説明できる物理現象の総体と解釈された．その場合，通例に反して，相対性理論をも古典物理学の中に含め，現代物理学は量子力学から出発するものと規定した．その最も重要な理由は，『古典物理学』の序文で述べたように，上記の意味の古典物理学と量子力学との間には，ある種の**断絶**が存在することにあった．この断絶は一方では自然現象自体の非連続性に基づくと同時に，他方では人間の自然認識の仕方にも——古典物理学にはなかった——全く新しい性格が現れてきたという両面性を持っている．この両面の中で，最初に明確になったのは前者，すなわち“自然は飛躍することがある”という側面である．それはいうまでもなく，1900年のPlanckによる**作用量子**の発見に始まるが，それが量子力学という独立した理論体系に変貌し，それに伴って，もうひとつの側面である自然認識の仕方の変革が行われるまでには，30年近くの年月が経過した．とくにこの期間の前半において，自然現象の連続性と個別的因果関係とを当然の前提と認める古典物理学の大海の中で，Planckの量子仮説は1滴の油のような矛盾的存在と見なされてきた．それが量子力学のような，逆に古典物理学を基礎づける理論にまで成長するのは容易でなかった．本章では，この間の消息を少しく詳しく述べることにしよう．

物理的世界の連続性・非連続性の問題を広く見れば，それは決して新しいものではない．物質が連続的か非連続的かという論争は，古代ギリシャから永く引き続いていた．しかし，この論争が経験科学としての物理学や化学の領域での実質的な意義を持つようになるのは近代以後である．本講座でいうところの“古典物理学”の出発点となった古典力学では通例，**質点**の運動が最初に取りあげられる．

それは**質量**は持っているが，大きさのない点であると定義された．そこでは物質の一種の非連続的構造が，当然のこととして認められているように見える．ただし『古典物理学』第I部，第1章，第2章で述べたように，Newton 自身は物質を微小な，しかし有限の大きさと一定の形を持つ多数の原子から構成されているものと想定した．この場合も，やはり物質に対する非連続的観点が採用されていた．通常の教科書的表現と Newton 自身との間に，このような違いはあったにせよ，物質を実際に細かく分割していった終着点が有限の大きさを持つ原子であるのか，それともさらに文字通り質点にまで行きつくのかは，19 世紀も後半になるまでは充分に明確な意味を持つ問題とはならなかった．たとえば 18 世紀に発達した弾性体や流体の力学では，『古典物理学』第I部，第3章で詳しく論じられているように，弾性体や流体は連続物質として取り扱うことができる．しかし，それは原子論が確立された後になってから見直せば，原子が充分に小さいから近似的に連続物体と見なしてもよいことを示していたに過ぎなかったのである．

古典物理学において原子ないし分子の概念の有効性が，はっきり示されたのは，19 世紀に発展した気体の分子運動論や，その一般化としての古典統計力学においてであった．それによって，多数の分子から成る集団の持つ平均的な性質として熱力学的諸現象を説明し得たばかりでなく，平均値からの偏差に原因する各種の**ゆらぎ**も取り扱えるようになった．そして典型的なゆらぎ現象である Brown 運動に分子運動論を適用することにより，巨視的物質の中に含まれる分子の数——したがってまた，その物質全体の質量を分子の数で割ることによって，個々の分子の質量——を推定し得るようになったのである．もちろん，それ以前からすでに Dalton の原子説が各種の化学変化に共通する諸法則を簡単に説明するのに成功しており，分子と原子が概念的に区別されるようになっていた．それら両方面からの研究成果を総合すると，物質は有限個数の分子から成ること，各分子はさらにいくつかの原子に分割されること，1 モルの物質中に含まれる分子の総数は常に一定で，

$$N \cong 6\times 10^{23} \tag{1.1.1}$$

であることなどが確かになった．この N は Avogadro 数，あるいは Loschmidt 数と呼ばれている．このようにして物質の素量性，すなわち空間が原子や分子によって非連続的にちりばめられていることを認めざるを得なくなった．ただし，

この段階においては化学元素の種類によって異なる数十種の原子を，それぞれ別種の存在と認めなければならなかった上に，それらの質量の比も正確に整数比とはならなかったので，すべての物質の質量が単一の共通単位の整数倍になっているとまでは言えなかった．実はこの問題には今日の素粒子の段階まできても，まだ解答があたえられていない．なお上記の19世紀的な原子論の段階においては，原子自身の空間的なひろがりがどうなっているかについても，確かなことはわかっていなかった．後に詳しく述べられるように，量子力学の成立によって，原子のひろがりという表現も，古典物理学とは全く違った意味を持つようになり，それに伴って物質の連続性と非連続性の問題も，新しく考え直さねばならなくなったのである．

§1.2　電気の素量性と電子の発見

物質の持つ諸性質の中で，前節で述べた質量と同じように物質と深く結びついていたのは電気であった．とくに1833年にFaradayの発見した電気分解の法則は，原子論の立場から見れば，種々の元素の原子ないし分子のひとつひとつが，電解質中において，ある一定量あるいはその整数倍の電荷を運ぶことと解釈される．それ以後，電荷の素量性がますます明らかとなり，1909年のMillikanによる有名な油滴実験に到って，電荷に最小単位，すなわち**電気素量** e が存在することが確かとなった．その値は

$$e \cong 4.8\times10^{-10} \quad (\mathrm{g}^{1/2}\cdot\mathrm{cm}^{3/2}\cdot\mathrm{s}^{-1}) \qquad (1.2.1)$$

である．その後の多くの実験にもかかわらず，今日に到るまでこれ以下の電荷は発見されていない．したがって，$e/3$ あるいは $2e/3$ の電荷を帯びた粒子の存在を仮定する単純なクォーク模型は，まだ全く実証的根拠を持たないのである．

なお，電気と関連して，物質と深く結びついている，もうひとつの性質である磁気に関しては，事情は大分ちがっている．本講座『古典物理学』第II部に詳しく述べられているように，古典電気力学の基礎方程式には，電気密度と電流密度が導入されているのに反して，これに対応する磁気密度や磁流密度というべきものは現れない．これは**磁気双極**(magnetic dipole)が結局は荷電粒子のつくる電流によるものであり，**磁気単極**(magnetic monopole)の存在を認めないことを意味していた．こういう考え方はその後もずっと受け入れられてきた．ただし，

ひとつの大きな変更として，量子力学の出現とほとんど同じ頃，すなわち1924年の Uhlenbeck と Goudsmit による電子の**スピン**(spin)という概念の導入がある．これは古典物理学的には荷電粒子の自転によるものと解釈されるが，後に詳しく述べられるように，それが量子化されること，および，たとい電子が大きさのない点粒子であるとしてもスピンの存在を認めなければならなかった．このスピンに伴って，電子は固有の**磁気能率**(magnetic moment)を持つ一種の磁気双極でもあることになった．これは古典物理学の立場からは理解の困難な電子の性質のひとつである．

なお磁気単極に関しては，量子力学の成立以後になって，Dirac がその存在の可能性を示唆したことがあるが，実験的には今日に到るまで証拠は何ひとつ得られていない．

ところで話が前後したが，よく知られているように，電子自身の存在は，すでに1897年の J. J. Thomson の実験によって確かになっていた．そしてそれを負の電気素量 $-e$ と非常に小さな質量とを持つ微小粒子と見なすことによって，広範囲の電磁気現象を説明することができた．その場合，『古典物理学』第II部§5.10で述べられているように，Lorentz の古典電子論では，質量が速度とともに増大するという点を除けば，通常の古典力学的粒子と同様に取り扱われてきた．ところが次節以下で繰り返し論じられるように，電子こそは本質的に量子力学的性格を持つ存在なのである．それにもかかわらず，古典電子論がいろいろな場合に有効性を示した理由についても，また後に論じることにしたい．

物質の基本的属性としての質量と電気量との間の本質的相違のひとつは，前者が正数値に限られているのに対して，後者が正負両方の値を取り得ることにあった．そして19世紀後半における真空放電に関する研究の進展に伴って正の電気を荷う粒子と負の電気を荷う粒子の性質が非常に違っていることが明らかになってきた．すなわち陰極線の実体がすでに述べた負に帯電した電子であったのに対して，陽極線の方はそれより遙かに大きな質量を持ち正に帯電した種々のイオンであった．この段階での正負の電気の著しい非対称性は，後節で述べるように原子の内部構造にそのまま反映していた．量子力学では，しかし粒子に対する**反粒子**(antiparticle)という新しい概念が導入され，また実際，陽電子や反陽子のような反粒子の存在が確認されるようになり，正負電荷の非対称性の問題も別の観

点から見直されることになった．さらにまた素粒子論の段階に移ると，正負のどちらかの電気を持つ素粒子の他に，中性子や中性微子，すなわちニュートリノや中性中間子など，いろいろな種類の電気的に中性の素粒子の存在を認めなければならなくなったが，それについては本講座第10巻『素粒子論』で改めて詳しく述べられるであろう．

§1.3 作用量子の発見

前節で述べたように，19世紀末には負の電荷を持つ電子が発見され，しかもそれはあらゆる物質に共通な構成要素であることが知られるに到った．このことは，その後の物理学の発展に広範な影響を及ぼした．とくに電子は物質を構成する他の要素である正の電荷を帯びた粒子とくらべるとはるかに質量が小さいことが，電子により大きな役割をあたえることになった．というのは，最も質量の小さい正電荷を帯びた粒子である水素イオン，すなわち**陽子**とくらべても，電子の質量は約1840分の1に過ぎないのに，電荷の絶対値は同じであるから，電場や磁場によって電子はとくに大きく加速されることになる．ところが古典電気力学によれば，加速された帯電粒子は加速度の自乗に比例する強さの電磁場を放出する．このようにして，電磁気的諸現象を微視的な立場から考察するならば，そこでは電子のふるまいがとくに重要な意味を持つことになる．このことはLorentzの古典電子論が相当な成功を収めたことによっても裏書された．その場合，電子も電磁場もともに古典物理学の枠の中で取り扱われていたのである．

そういう状況の中から，1900年にPlanckの量子仮説が出現したのは，まさに驚くべきことであった．それまでの数年間，Planck自身は熱輻射の問題を何とかして古典物理学によって解決しようと悪戦苦闘を続けていたが，どうしても実験と一致する結果を純理論的に演繹することができなかった．その間の事情を簡潔に述べるのは極めて困難であるが，その主な理由は，一口に熱輻射といわれる現象自身の複雑性にある．ごく大ざっぱに言えば，それは高温の物体から熱線や可視光線や紫外線などの電磁輻射が放出される現象を指している．一般に温度が高くなるほど輻射の強度は大きくなり，それに伴って放出される電磁波の波長も全体として短かくなってゆくことは，よく知られている通りである．しかし熱輻射の現象を定量的に考察しようとすると，物体を構成する物質が何であるかが問

題になり，それに伴って一般的な法則の導出が困難になる．そこで実際の諸物体の特性を度外視して，黒体なる理想的な物体が想定された．黒体とは，その表面に入射する輻射を全部吸収し，少しも反射，透過または散乱しないような物体を意味する．つまり入射した輻射のエネルギーは一旦黒体の中に貯えられ，形を変えて——一般に異なる波長の輻射として——再放出されるわけである．そこで，このような黒体が存在し得るものと想定し，あらゆる波長の輻射を反射する理想的な壁で囲まれた空洞の中に小量の黒体を入れたとしよう．詳細の議論は省略するが，結論的にいえば，この空洞の中で輻射と黒体とが絶対温度 T で熱平衡の状態に達したならば，そこに黒体輻射と同等な空洞輻射が実現されたことになる．さて，この空洞の任意点付近の単位体積内に含まれる輻射のエネルギーは，電磁場のエネルギー密度

$$U=\frac{1}{8\pi}(\boldsymbol{E}^2+\boldsymbol{H}^2) \tag{1.3.1}$$

であたえられる．ただし $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}$ はそれぞれ，その点の電場および磁場を表すベクトルである．ところで一方，輻射を種々の振動数の電磁波の集まりと考え，振動数が $(\nu, \nu+d\nu)$ の間にある輻射のエネルギー密度を $u_\nu d\nu$ とすると，

$$U=\int_0^\infty u_\nu d\nu \tag{1.3.2}$$

が成立する．Kirchhoff は熱力学の第2法則に基づき，u_ν が振動数 ν および絶対温度 T だけの関数で，壁および黒体を構成する物質に無関係であることを示した．次にまた輻射の全エネルギー密度 U が T の4乗に比例すべきこと，すなわち Stefan-Boltzmann の法則

$$U=\sigma T^4 \tag{1.3.3}$$

が成立すべきことが知られていた．さらに Wien は熱力学的ないし分子運動論的考察によって，黒体輻射のエネルギーの分布関数 u_ν は ν および T に

$$u_\nu(\nu, T)=\nu^3 f(\nu/T) \tag{1.3.4}$$

なる形で依存すべきことを推論した．この表式の中の $f(\nu/T)$ の関数形は一義的に決めることはできなかったが，エネルギー分布を振動数 ν の関数として描けば，その極大 ν_m が絶対温度 T に比例して大きくなってゆくという関係が関数 $f(\nu/T)$ の取り方にかかわりなく成立することになる．この Wien の変位法則は

実験とよく一致している．Wienはとくに(*1.3.4*)の中の関数として，半経験的に

$$f(\nu/T)=\frac{\alpha}{c^2}\exp(-\beta\nu/T) \qquad (1.3.5)$$

を選びだした．ただしcは光速度で，α,βは実験との比較によって決められる定数である．しかし，この関数を使った分布公式(*1.3.4*)は，ν/Tの非常に大きい場合を除いては実験と一致しない．

ところで一方，古典電気力学の立場から考察すると，空洞輻射は種々の方向の種々の振動数の定常電磁波に分解できる．それらは黒体を構成する物体内の多数の電子に同じ振動数の強制振動を引き起こすことによって吸収される反面，振動する電子はそれぞれ同じ振動数の電波を放出する．さらにまた，物体内ではいろいろな振動数で振動する電子の間で，始終エネルギーのやりとりが行われるであろう．そういう複雑な機構によって，ある温度Tで輻射と物質から成る全系が熱平衡に到達したとすると，輻射エネルギー密度の分布関数として

$$u_\nu d\nu=\frac{8\pi\nu^2}{c^3}kTd\nu \qquad (1.3.6)$$

が，古典電気力学および古典統計力学からの必然的結論として出てくる．これがRayleigh-Jeansの輻射式といわれているもので，(*1.3.4*)の中の関数fとして

$$f(\nu,T)=\frac{8\pi}{c^3}(T/\nu) \qquad (1.3.7)$$

と取った場合に当っている．ただし(*1.3.6*)の中のkはBoltzmann定数

$$k=R/N\cong 1.38\times10^{-16}\quad(\mathrm{erg\cdot K^{-1}}) \qquad (1.3.8)$$

で，NはAvogadro数，Rは1モルについての気体定数を表す．ところがRayleigh-Jeansの式(*1.3.6*)はWienの式(*1.3.5*)とは逆に，振動数νの大きい場合に，実験と全く食いちがってしまうばかりでなく，全エネルギー密度(*1.3.2*)が無限大になってしまうという内在的困難を免かれることができない．

そこで1900年に到ってPlanckは，振動数νのあらゆる領域にわたってLummer, Pringsheimなどの最も精密な実験と一致する公式

$$u_\nu d\nu=\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{d\nu}{\exp(h\nu/kT)-1} \qquad (1.3.9)$$

を案出した．これがよく知られた**Planckの輻射式**である．ただしhは**作用**(action)の次元を持つ定数で，Planckの定数と呼ばれ，その数値は

$$h \cong 6.6\times10^{-27} \quad (\mathrm{erg\cdot s}) \tag{1.3.10}$$

である．Planck 式(*1.3.9*)は ν の小さい極限では Rayleigh-Jeans 式(*1.3.6*)に，大きい極限では Wien 式(*1.3.5*)と一致することが容易にわかる．さらに(*1.3.9*)を(*1.3.2*)に代入すると Stefan-Boltzmann の法則(*1.3.3*)が再現され，その中の定数 σ は $\sigma=8\pi^5k^4/15c^3h^3$ となる．(*1.3.9*)を理論的に導き出すことが，非常に重要な次の課題として残されていた．Planck は同じ1900年の12月にそれに成功したが，それが古典物理学から量子論ないし量子力学へ向っての決定的な第一歩となったのである．すなわち Planck は何らかの形で古典物理学とは全く相容れない，新しい性格の非連続性を仮定することによってしか，(*1.3.9*)なる公式は出てこないことを示したのである．彼の最初の論文の議論とは少し違うが，以下では最も簡明な導出法を述べることにしよう．

古典統計力学では**エネルギーの等分配の法則**(law of equipartition of energy)が，いろいろな場合に成立すると考えられてきた．たとえば非常に多くの同種の分子から成る気体が絶対温度 T で熱平衡の状態にあったとしよう．気体が充分希薄で，分子同士が時々衝突するほかは，たがいに独立に運動していると見なしてよい場合，j 番目の分子の速度の成分を v_{jx}, v_{jy}, v_{jz} とすると，運動のエネルギーは

$$\varepsilon_j = \frac{1}{2}m({v_{jx}}^2+{v_{jy}}^2+{v_{jz}}^2) \tag{1.3.11}$$

となる．ただし m は分子の質量である．そこでこの分子が ε_j なるエネルギーを持つ確率は，Boltzmann 統計に従って

$$\exp(-\varepsilon_j/kT) \tag{1.3.12}$$

に比例しているとすると，ε_j の平均値は

$$\bar{\varepsilon}_j = \iiint \varepsilon_j \exp(-\varepsilon_j/kT)\,dv_{jx}dv_{jy}dv_{jz} \Big/ \iiint \exp(-\varepsilon_j/kT)\,dv_{jx}dv_{jy}dv_{jz}$$
$$= \frac{3}{2}kT \tag{1.3.13}$$

となる．これはどの分子にも平均として $(3/2)kT$ なるエネルギーが均等に分配されていることを意味する．気体の分子の総数を N とすると，全エネルギーは

$$E = \sum_{j=1}^{N}\bar{\varepsilon}_j = \frac{3}{2}NkT \tag{1.3.14}$$

となり，さらに細かくいえば，各分子の運動のエネルギーは x, y, z の 3 方向に分けて考えることができるが，それらの平均値はすべて等しく $(1/2)kT$ で，(*1. 3. 14*) の代りに

$$E=\frac{1}{2}fkT \tag{1.3.15}$$

と書くこともできる．ここで $f\equiv 3N$ は N 個の分子から成る系の自由度——正確にいえば分子の重心の運動だけを考えた場合の自由度——で，(*1. 3. 15*) は各自由度にそれぞれ平均として $(1/2)kT$ なるエネルギーが分配された結果を表わすとも言いかえられる．これから理想気体の体積を一定にした場合の比熱

$$C_v=\frac{dE}{dT}=\frac{3}{2}Nk \tag{1.3.16}$$

が得られる．1 モルの気体の場合には N は Avogadro 数で Nk は気体定数となるから

$$C_v=\frac{3}{2}R\cong 3 \quad (\mathrm{cal\cdot K^{-1}}) \tag{1.3.17}$$

というよく知られた結果と一致する．

次に巨視的な古典力学系が多数の微視的な**調和振動子** (harmonic oscillator) から構成されていると考えられる場合には，各振動子の運動のエネルギーと位置のエネルギーとは 1 周期について時間的に平均すれば等しくなる．そこで上記の自由運動の場合と同様に Boltzmann 統計が成立するとすると，振動子の各自由度について平均エネルギーが kT となる．そこでたとえば 1 モルの固体を N 個の調和振動子の集まりと見なすならば，温度 T で熱平衡状態にある固体の振動の全エネルギーは

$$E=3NkT=3RT \tag{1.3.18}$$

となり，比熱は

$$C_v=3R\cong 6 \quad (\mathrm{cal\cdot K^{-1}}) \tag{1.3.19}$$

が得られる．これは Dulong-Petit の法則に他ならない．

さて上記と同様な考察を空洞輻射の場合に対して行ったらどうなるか．一方では黒体を構成する物質の中では多数の電子が電磁場の中で，いろいろな振動数の振動を行うであろうから，それを振動子の集まりと見なすことができる．他方で

は後に§1.5で詳しく述べるように，空洞の中の輻射場はいろいろな振動数の定常電磁波の集まりであり，これも無数の違った振動数を持った振動子から成る古典力学系と見直すことができる．しかし，固体の機械的振動の場合には，分子――あるいは原子やイオン――の数が有限であることに対応して，力学系としての自由度の数も有限で，全エネルギーEも，たとえば(1.3.18)のような有限値を取り得たのに対して，空洞輻射の場合の電磁的定常振動としては，いくらでも振動数の大きなものが可能であるから，力学系としての自由度も無限大となる．そこへも古典統計力学の等分配の法則が適用できるものとした場合に得られるのが，すなわち既述のRayleigh-Jeansによるエネルギー密度の式(1.3.6)であり，これをあらゆる振動数νにわたって積分した結果として，全エネルギー密度Uが無限大になるという不合理な結論になってしまうわけである．

ところで等分配の法則なるものは，自由運動の場合にせよ，振動の場合にせよ，エネルギーが連続的に変わるという大前提を認め，(1.3.13)のような積分を行った結果として出てきたのである．そこでPlanckは調和振動子の場合について，この大前提を捨て，エネルギーεは作用量子hと振動数νの積の整数倍の値，すなわち

$$\varepsilon = nh\nu \qquad (n=0, 1, 2, \cdots) \tag{1.3.20}$$

に限られるという仮定で置きかえてみた．これはエネルギーにも有限の単位，すなわち**エネルギー量子**$h\nu$の存在を認めることであるともいえる．するとBoltzmann統計はそのまま認めるとしても，νなる振動数の振動子の平均のエネルギーは，(1.3.13)の代りに

$$\begin{aligned}\bar{\varepsilon} &= \sum_{n=0}^{\infty} nh\nu\cdot\exp(-nh\nu/kT)\Big/\sum_{n=0}^{\infty}\exp(-nh\nu/kT)\\ &= \frac{h\nu}{\exp(h\nu/kT)-1}\end{aligned} \tag{1.3.21}$$

となる．これに空洞の単位体積あたりの振動数が$(\nu, \nu+d\nu)$の間にある振動子の数$(8\pi\nu^2/c^3)d\nu$を掛けると，Planckの式(1.3.9)が得られることになる．ただし，この場合(1.3.20)によってエネルギーが量子化されて，飛び飛びの値しか取れない振動子は，輻射そのものであるか，それとも黒体の中の電子の振動の方であるかについては，なお論議の余地が残されている．これについては§1.5で改め

て考察することにしよう．

いずれにせよ，古典物理学の理論体系の全体は，“自然は飛躍しない”，すなわち運動も波動もみな一般に連続的な過程であるという大前提の上に立てられていた．すなわち物質的な粒子の場合には，その位置や速度が，そして電磁場の場合にはその強さや方向が，時間と共に常に連続的に変化してゆく．原子のような不変の実体や，電荷のように常に保存される物理量に非連続性が認められたとしても，それは自然現象の時間的経過の非連続性を意味するものではないと考えられてきた．さらにまた電子の場合のように，速度が非常に大きくなると，質量までも増大することになっても，それもやはり連続的な変化の一種であると見なすことができた．そういう状況の中に Planck がエネルギー量子を持ちこんだのは，まさに古典物理学を根底から揺るがす事件であった．なぜかといえば，電磁場——あるいは電子の振動——のエネルギーが $h\nu$ という単位の整数倍の値しか取り得ないということは，電磁場——あるいは電子の運動——の時間的変化が連続的であるという大前提と完全に矛盾するからである．当時 Planck は自分の子に“私は Newton の発見と同じくらい重要な発見をした”と語ったと伝えられているように，彼自身も事の重大性に驚いたわけであった．古典物理学の大海に投げられたこの一石がどんな大きな波紋を生じることになるかについては，以下の数節でだんだんと述べてゆきたいと思う．

§1.4 光の粒子説の復活

前節で述べたように，振動数 ν なる輻射のエネルギーは $h\nu$ なる単位の整数倍 $nh\nu$ $(n=0, 1, 2, \cdots)$ という値だけしか取れないように量子化されている．ということは電磁場のエネルギーが連続的にその値を変化するという古典電気力学の基本的な考え方と完全に矛盾する．この矛盾から逃れるために，Planck は電磁場のエネルギー自身は本来，連続的にいろいろな値を取り得るが，黒体を構成する物質との間でエネルギーを授受する場合には，その大きさは $h\nu$ の整数倍に限られるという考え方を採用しようとした．これに対して Einstein は 1905 年に，Planck の公式 (*1. 3. 9*) 自身が輻射の粒子性を示すことを，エネルギーのゆらぎの考察から明らかにし，Planck とは反対に光の粒子説の復活の方向へと進んでいった．本講座『古典物理学』第II部で詳しく論じられているように，19 世紀は光

の波動説の全盛時代であり，Maxwell によって光は電磁波と同定されていた．ところが同じ1905年に Einstein は一方では特殊相対論を提唱して，エーテルを否定し，真空中を連続的に電磁波が伝わるという解釈をした．ところが他方では物質から振動数 ν の光が放出される過程は

$$\varepsilon = h\nu \tag{1.4.1}$$

なるエネルギーを持つ微粒子，すなわち**光量子**あるいは**光子**が飛び出す素過程にまで分解でき，また光が吸収される過程は光子が飛びこんで消滅する素過程にまで分解できるという仮説をも提唱したわけである．それはある意味では Newton の光の粒子説の復活でもあった．Einstein が輻射のエネルギーのゆらぎという比較的難解な問題から出発して，光の粒子説まで進み得たのは，ひとつにはそれが当時いろいろな実験が行われていた**光電効果**の説明に非常に都合がよかったからであった．すなわち Lenard などの実験によると，金属の表面に光——あるいは紫外線——を当てた場合に飛び出す電子の速度分布は，光の強さには無関係で，その振動数だけできまる．そしてまた，振動数が一定の値以上にならなければ，いくら光が強くても電子が出てこない．ところが光の波動説によると，金属内の電子は光の波，すなわち電磁波の振幅の周期的な影響を受けて運動状態を変化させられるのであるから，光が強いほど電子の獲得する運動のエネルギーは大きくなり，ついに金属の外に飛び出すことになる．したがって，この場合の決定的な因子は光の強さであって振動数ではないわけであるが，これは明らかに上記の実験事実と矛盾する．これに反して光量子説によれば，金属内の電子は(1.4.1)であたえられるエネルギーを持つ光子を1個吸収し，$h\nu$ というエネルギーを獲得するであろう．その場合，振動数 ν が充分大きく，$h\nu$ が電子を金属外に取り出すのに要する仕事 W より大きければ

$$E = h\nu - W \tag{1.4.2}$$

なる運動のエネルギーを持って，外へ飛び出せるはずである．これは上記の実験結果とよく一致する．さらにまた波動説によると，光が非常に弱ければ，電子が外へ出るのに必要なエネルギーを貯えるまでには相当な時間を要するはずであるが，事実はこれに反して，光を当てるとすぐ光電効果が起こる．この点も光量子説ならば，電子は一度に光子のエネルギー $h\nu$ を獲得したとして，容易に説明できる．

光量子説をさらに徹底させるならば，光子は

$$p = h\nu/c = h/\lambda \tag{1.4.3}$$

なる大きさの運動量を持ち，その方向は光の波の進む方向と一致しているという仮定をつけ加えるのが自然である．ただし $\lambda=c/\nu$ は光の波長を表す．すでに古典電気力学では電磁場のエネルギー密度 U が(1.3.1)であたえられるのに対応して，運動量密度が Poynting ベクトル

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{c}[\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}] \tag{1.4.4}$$

であたえられていた．平面波の場合には，$\boldsymbol{S}$ の大きさは U/c となり，その方向は波の進行方向と一致していた．これを光の粒子の立場から見直したのが，(1.4.3)であると考えられる．ずっと後，すなわち1923年になって発見された**Compton効果**は，この仮説の直接の明確な証拠となった．Compton は石墨のような物質によって散乱された X 線の波長 λ' は，もとの波長 λ より少し長くなり

$$\lambda'-\lambda = 0.024\times10^{-8}\times(1-\cos\varphi) \quad (\text{cm}) \tag{1.4.5}$$

なる関係が成立することを知った．ただし φ は図1.1で示すように，散乱された X 線の入射 X 線に対する散乱角度である．Compton と Debye は，これを入射 X 線を構成する光子と石墨の中の電子との弾性衝突によるものと考えた．入射X線の振動数を ν とすると，石墨の中の電子の結合エネルギーは光子のエネルギー $h\nu$ よりずっと小さいから，自由電子と見なし，かつ最初静止していたとすると，そのエネルギーは相対論によれば mc^2 である．ただし m は電子の静止質量で

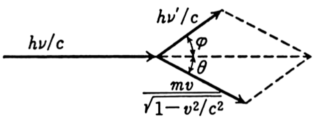


図1.1 Compton 効果

$$m = 0.91\times10^{-27} \quad (\text{g}) \tag{1.4.6}$$

なる値を持つ．散乱されて出てゆく X 線の振動数を ν' とすると，$h\nu'$ はこれを構成する光子のエネルギーである．衝突の結果として走り出した反跳電子の速度を v とすると，その相対論的エネルギーは $mc^2/\sqrt{1-v^2/c^2}$ であるから，エネルギー保存の法則は

$$h\nu+mc^2 = h\nu'+mc^2/\sqrt{1-v^2/c^2} \tag{1.4.7}$$

となる．

次に入射する光子および散乱された光子の運動量の大きさは，それぞれ $h\nu/c$, $h\nu'/c$ であり，相対論によれば反跳電子の運動量の大きさは $mv/\sqrt{1-v^2/c^2}$ である．したがって図1.1のように，入射方向に対して光子は φ なる角度で，電子は θ なる角度で出てゆくものとすると，運動量保存の法則は

$$\left.\begin{aligned} h\nu/c &= (h\nu'/c)\cdot\cos\varphi + (mv/\sqrt{1-v^2/c^2})\cdot\cos\theta \\ (h\nu'/c)\cdot\sin\varphi &= (mv/\sqrt{1-v^2/c^2})\cdot\sin\theta \end{aligned}\right\} \qquad (1.4.8)$$

なる2式で表される．(*1.4.7*)および(*1.4.8*)から v と θ を消去すると

$$\lambda'-\lambda = (c/\nu')-(c/\nu) = (h/mc)(1-\cos\varphi) \qquad (1.4.9)$$

が得られる．これは(*1.4.5*)と同形であるばかりでなく，h, c, m に対する実際の値を入れると，数係数までよく一致する．

このようにしてCompton効果は光量子説によって簡単に説明できるのに反して，古典電気力学の立場からは全く理解できない．なぜかといえば，入射X線を電磁波と考えるならば，電場のベクトルは入射方向に直角で，その方向に電子も振動させられる．しかし，その振動数は入射波の振動数 ν と同一であるから，振動する電子を中心として四方にひろがってゆく散乱波の振動数も ν と同じのはずであり，上記の実験結果と完全に矛盾する．

そればかりでなく，その後のBotheとGeigerの実験によって，散乱された光子と反跳電子とは同時に出てくることが判明し，さらにComptonとSimonの実験によって，それらの出てくる方向も(*1.4.7*), (*1.4.8*)から決定されたものとよく一致することも確かめられた．このようにして一方では光の粒子性はもはや疑う余地がないことになった．他方ではしかし，光やX線の干渉や回折に関する数多くの現象は，それが波動性を持つことをも明瞭に物語っている．このように光が粒子と波動という，たがいに矛盾する性質を兼ね備えていることは，古典物理学にとって解き難い謎であった．そこでは粒子は‘物’であり，波は現象すなわち‘事’であった．光はそのどちらかであるしかなかったのである．そして(*1.4.1*)や(*1.4.3*)は，まさに両者の奇妙な関係を示す式であった．

§1.5 周期運動に対する量子条件

そういう状況の中で1911年に行われた第1回のソルヴェイ国際会議で，Planckは次のように述べている．光が電磁波として空間を伝わってゆく過程は，

あくまで連続的なものと考えなければ，干渉や回折は到底説明できない．しかし，それが物質によって吸収されたり，物質から放出されたりする際には，光のエネルギーは $h\nu$ の整数倍という飛び飛びの値に限られていると考えてもよいであろう．すると空洞輻射の場合においても，空洞内の黒体と光とが相互作用する際だけ非連続的変化が起こり，その原因は黒体内の電子の振動のエネルギーの方が量子化されていることに帰着できる．そう考えるなら，§1.3の中の平均エネルギー $\bar{\varepsilon}$ に関する表式(*1.3.21*)はもともとは振動数 ν で調和振動する電子の平均エネルギーを意味していたことになる．しかし，そう考えても Planck の公式(*1.3.9*)は同じように出てくる．なぜかといえば，黒体と熱平衡の状態にある輻射の方の振動数 ν なる定常波も，平均として $\bar{\varepsilon}$ と同じエネルギーを持つはずだからである．以上が実は1900年の Planck の議論を，より忠実に再現していることにもなっている．

さて Planck は調和振動子を古典力学系と考えた場合，その運動にどのような制限をあたえたならば(*1.3.20*)なるエネルギーに対する条件が出てくるかを考察した．古典力学における正準形式から出発すると1次元の調和振動子の運動方程式は

$$\frac{dp}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial q},\qquad \frac{dq}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p} \tag{1.5.1}$$

と書ける．ただし H は Hamilton 関数で

$$H=\frac{1}{2m}p^2+2\pi^2m\nu^2q^2 \tag{1.5.2}$$

なる形をしており，q, p はそれぞれ振動子の位置座標および，それに共役な運動量を表わす．また m は振動子の質量，ν は振動数である．(*1.5.1*)の一般解は

$$\left.\begin{aligned} q &= a\sin[2\pi\nu(t-t_0)] \\ p &= b\cos[2\pi\nu(t-t_0)] \end{aligned}\right\} \tag{1.5.3}$$

なる形をしている．ただし a, b, t_0 は積分定数で，a, b の間には

$$b=2\pi m\nu a \tag{1.5.4}$$

なる関係が成立している．そこで，図1.2のように，q を横軸，p を縦軸に取り，振動子の運動状態を (q, p) 平面上の――すなわち2次元の**位相空間**(phase space)内の――代表点で表わすことにすると，時間 t の経過につれて代表点は

$a>b$ ならば a および b を長径および短径——$a<b$ ならばその逆——とする楕円軌道を描くことになる．たとえば $t=t_0$ なる時刻に代表点が p 軸上の点 P にあったとすると，それ以後は時計の針と同じ向きに進んで Q, R, S を経て，もとの点 P に戻り，さらに同じ運動を繰り返す．この場合，振動子のエネルギーは

$$E = H(p, q) = \frac{1}{2m}b^2\cos^2[2\pi\nu(t-t_0)]+2\pi^2 m\nu^2 a^2\sin^2[2\pi\nu(t-t_0)] \tag{1.5.5}$$

で，(1.5.4) を考慮すると

$$E = \pi ab\nu \tag{1.5.6}$$

となる．

ところが Planck に従って，振動子のエネルギーは

$$E = nh\nu \qquad (n=0, 1, 2, \cdots) \tag{1.5.7}$$

なる離れ離れの値しか取れないとし，(1.5.6) と比較すると

$$\pi ab = nh \tag{1.5.8}$$

が得られる．この式の左辺は楕円によって囲まれた面積を表している．したがって図 1.2 に示すように，$n=0$ の場合には楕円は原点 O に収縮し，全然振動がないことを意味している．$n=1$ の場合には一番中側の楕円となり，その占める面積がちょうど h となる．そういうようにして次々と，より大きな楕円が，**量子条件** (1.5.8) によって選びだされてゆくが，この条件はまた

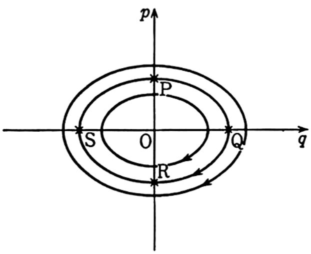


図 1.2　位相空間での調和振動子の運動

$$\oint pdq = nh \qquad (n=0, 1, 2, \cdots) \tag{1.5.9}$$

と書くことができる．ただし左辺の積分は，楕円の全周について時計の針の進む向きに取った曲線積分を意味する．

このようにして，古典力学的に可能な，あらゆる軌道の中から，飛び飛びに量子論的に許される軌道を選び出す条件 (1.5.9) を，次のように少しだけ変更することもできる．すなわち位相平面の上で

$$\iint dpdq = h \tag{1.5.10}$$

なる面積を持つ領域の中に，ひとつだけ軌道が存在し得ると仮定して見る．すると上記の量子条件(*1.5.9*)は，その特別の場合となり，一般には

$$\oint pdq = (n+\delta)h \qquad (n=0, 1, 2, \cdots) \tag{1.5.11}$$

と取ってもよいことになる．ただしδは0と1の間の一定数を表す．実際，後述のように量子力学では$\delta=1/2$に対応する場合が実現されることが示される．量子条件を(*1.5.10*)のような形に書くと，これを統計力学の立場から一般化が容易にできる．なぜかといえば，古典力学の Liouville の定理によれば，無数の代表点の集まりが位相空間で占める体積は，運動方程式にしたがって各代表点が動いていっても，時間的に変化しない．それゆえ，自由度fなる古典力学系の量子論的に許される運動状態は

$$\underbrace{\int\cdots\int}_{2f} dq_1\cdots dq_f dp_1\cdots dp_f = h^f \tag{1.5.12}$$

なる体積ごとに，ひとつだけしかないという仮定を導入することができる．これは古典統計力学から後に述べる量子統計力学に到る途中の段階としての量子化の方法である．

さて話は少し戻って，年代的に順序が逆になるが，1910年に Debye は空洞輻射を古典力学的調和振動子の集まりとして，これに量子論を適用する手法を展開した．それには先ず真空中の電磁場に対する Maxwell 方程式

$$\left.\begin{aligned} \mathrm{curl}\,\boldsymbol{H} - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} = 0, \qquad \mathrm{div}\,\boldsymbol{E} = 0 \\ \mathrm{curl}\,\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial t} = 0, \qquad \mathrm{div}\,\boldsymbol{H} = 0 \end{aligned}\right\} \tag{1.5.13}$$

を

$$\boldsymbol{H} = \mathrm{curl}\,\boldsymbol{A}, \qquad \boldsymbol{E} = -\mathrm{grad}\,A_0 - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \tag{1.5.14}$$

なる関係によって電磁ポテンシャル A_0, $\boldsymbol{A}$ に関する方程式に書き直すと

$$\left.\begin{aligned}\left(\Delta-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)A_0=0\\\left(\Delta-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\boldsymbol{A}=0\end{aligned}\right\}\tag{1.5.15}$$

が得られる．ただし $A_0, \boldsymbol{A}$ の間では Lorentz 条件

$$\frac{1}{c}\frac{\partial A_0}{\partial t}+\operatorname{div}\boldsymbol{A}=0\tag{1.5.16}$$

が満足されているものとする．しかし $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}$ をあたえても，$A_0, \boldsymbol{A}$ は一義的には決まらない．なぜかといえば，$\Lambda(x, y, z, t)$ が D'Alembert 方程式

$$\left(\Delta-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\Lambda=0\tag{1.5.17}$$

を満たす任意関数であれば，

$$A_0'=A_0-\frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t},\qquad \boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}+\frac{1}{c}\operatorname{grad}\Lambda\tag{1.5.18}$$

からも (1.5.14) なる関係式によって，同じ $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}$ が導き出せるからである．それ故，Λ を適当に取れば $A_0'=0$ とすることができる．その場合の $\boldsymbol{A}'$ を改めて $\boldsymbol{A}$ と書くことにすると，(1.5.14) は

$$\boldsymbol{H}=\operatorname{curl}\boldsymbol{A},\qquad \boldsymbol{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\tag{1.5.19}$$

となる．各辺の長さが L なる立方体の中の空洞輻射を考えると

$$\boldsymbol{A}=\sum_{\lambda}q_\lambda(t)\boldsymbol{A}_\lambda(\boldsymbol{r})\tag{1.5.20}$$

なる展開ができる．ただし $\boldsymbol{A}_\lambda$ は

$$\Delta\boldsymbol{A}_\lambda+\frac{4\pi^2\nu_\lambda{}^2}{c^2}\boldsymbol{A}_\lambda=0,\qquad \operatorname{div}\boldsymbol{A}_\lambda=0\tag{1.5.21}$$

を満たし，その成分は L を周期とする x, y, z の周期関数である．(1.5.20) を (1.5.15) の中の $\boldsymbol{A}$ に代入すると

$$\frac{d^2q_\lambda}{dt^2}+4\pi^2\nu_\lambda{}^2q_\lambda=0\tag{1.5.22}$$

が得られるから，ν_λ が振動数に対応することになる．(1.5.20) の展開は $\lambda=1, 2, \cdots$ と無限に多くの項を含んでいるが，$\boldsymbol{A}_\lambda$ $(\lambda=1, 2, \cdots)$ なる関数の系列としては，たとえば

$$\left.\begin{array}{l}\sqrt{8\pi c^2/L^3}\,\boldsymbol{e}_\lambda\cos(2\pi\boldsymbol{k}_\lambda\cdot\boldsymbol{r})\\ \sqrt{8\pi c^2/L^3}\,\boldsymbol{e}_\lambda\sin(2\pi\boldsymbol{k}_\lambda\cdot\boldsymbol{r})\end{array}\right\}\qquad(\lambda=1,2,\cdots)\tag{1.5.23}$$

を選ぶことができる．ただし波数ベクトル $\boldsymbol{k}_\lambda$ の絶対値 k_λ と ν_λ は

$$k_\lambda=\nu_\lambda/c\qquad(\lambda=1,2,\cdots)\tag{1.5.24}$$

なる関係にあり，$\boldsymbol{k}_\lambda$ の成分は

$$k_{\lambda x}=n_{\lambda x}/L,\qquad k_{\lambda y}=n_{\lambda y}/L,\qquad k_{\lambda z}=n_{\lambda z}/L\tag{1.5.25}$$

なる値に限られる．ここで $n_{\lambda x}, n_{\lambda y}, n_{\lambda z}$ は 0 または任意の整数であってよいが，ただ $(n_{\lambda x}, n_{\lambda y}, n_{\lambda z})$ と $(-n_{\lambda x}, -n_{\lambda y}, -n_{\lambda z})$ とは違った関数 $\boldsymbol{A}_\lambda$ をあたえないから，一方を取れば他方は省く必要がある．$\boldsymbol{e}_\lambda$ としては $\boldsymbol{k}_\lambda$ に垂直な単位ベクトルで，しかもたがいに垂直なものを 2 個選びだすことにする．すると $\boldsymbol{A}_\lambda(\lambda=1,2,\cdots)$ の全体が固有振動の固有関数の完全系を形づくることになる．そして空洞全体についての体積積分を行えば

$$\iiint\boldsymbol{A}_\lambda\boldsymbol{A}_\mu dxdydz=4\pi c^2\delta_{\lambda\mu}\tag{1.5.26}$$

が成立する．ただし $\delta_{\lambda\mu}$ は $\lambda=\mu$ なら 1，$\lambda\neq\mu$ なら 0 を意味する．

さて(*1.5.22*)は固有振動の振幅 $q_\lambda(t)$ の時間的変化を規定する方程式であるが，これを調和振動子に対する運動方程式と見直すことができる．すなわち q_λ に正準共役な運動量を p_λ，Hamilton 関数を

$$H=\frac{1}{2}p_\lambda^2+2\pi^2\nu_\lambda^2q_\lambda^2\tag{1.5.27}$$

と取ると，正準運動方程式(*1.5.1*)から直ちに $dq_\lambda/dt=p_\lambda$ および(*1.5.22*)が得られる．これに物質粒子の振動の場合と同じ量子条件(*1.5.9*)を適用すると，この振動子のエネルギーは(*1.5.7*)となる．

このように空洞輻射は無限に多くの種類の固有振動のそれぞれに対応する調和振動子の集まりと見直すことができる．すると振動数 ν なる振動子は $nh\nu$ $(n=0, 1, 2, \cdots)$ のエネルギーを持ち得る．それは n 個のエネルギー量子 $h\nu$ から成ると考えてもよい．各辺の長さが L なる立方体の形をした空洞を考えると，その中の固有振動で振動数が ν と $\nu+\varDelta\nu$ の間にあるものの数は，$\varDelta\nu$ が ν に比して充分小さければ

$$\frac{8\pi\nu^2L^3}{c^3}\Delta\nu = 8\pi\left(\frac{L}{\lambda}\right)^3\frac{\Delta\nu}{\nu} \qquad (1.5.28)$$

となる．ただし$\lambda=c/\nu$は波長で，これがLに比して小さければ，$\Delta\nu$をνに比して充分小さく取っても，(1.5.28)は非常に大きな数になる．そこで振動数がそれぞれ

$$(\nu_1, \nu_1+\Delta\nu_1=\nu_2), \quad (\nu_2, \nu_2+\Delta\nu_2=\nu_3), \quad \cdots\cdots\cdots \qquad (1.5.29)$$

の範囲にある固有振動に分けてみる：あるいはエネルギーが

$$(\varepsilon_1, \varepsilon_1+\Delta\varepsilon_1=\varepsilon_2), \quad (\varepsilon_2, \varepsilon_2+\Delta\varepsilon_2=\varepsilon_3), \quad \cdots\cdots \qquad (1.5.30)$$

の範囲の振動子のエネルギー量子に細かく分けると言いかえてもよい．ただし

$$\varepsilon_j = h\nu_j \qquad (j=1, 2, \cdots) \qquad (1.5.31)$$

である．するとj番目の範囲にある振動子の数は(1.5.28)により

$$N_j = \frac{8\pi\nu^2L^3}{c^3}\cdot\Delta\nu_j \qquad (j=1, 2, \cdots) \qquad (1.5.32)$$

となる．これらの各範囲内に実際存在するエネルギー量子の数がn_j $(j=1, 2, \cdots)$であるような分布が実現される仕方の総数は

$$P = \prod_j \frac{(N_j+n_j-1)\,!}{n_j!\,(N_j-1)\,!} \qquad (1.5.33)$$

であることが容易にわかる．そこで振動子の集まりの全エネルギー——それは空洞内の電磁場の全エネルギーの量子化されたものに他ならないことが示されるが——

$$E = \sum_j \varepsilon_j n_j \qquad (1.5.34)$$

が一定であるという条件のもとで，Pあるいは$\log P$が最も大きくなる分布を求めてみる．それはβを未定係数とする，n_jの任意の変分δn_jに対して

$$\delta(\log P) - \beta\delta E = 0 \qquad (1.5.35)$$

すなわち

$$\sum_j \delta n_j\left(\frac{\partial(\log P)}{\partial n_j} - \beta\varepsilon_j\right) = 0 \qquad (1.5.36)$$

を満足しているはずである．nがあまり小さくない整数の場合

$$\log(n!) = n\log n - n \qquad (1.5.37)$$

が近似的に成立するから，これを(1.5.33)に入れ，(1.5.36)が任意の変分δn_j

に対して成立する条件を求めると

$$\log\{(N_j+n_j)/n_j\}-\beta\varepsilon_j=0 \tag{1.5.38}$$

あるいは

$$n_j=\frac{N_j}{\exp(\beta E_j)-1} \tag{1.5.39}$$

が得られる．すなわち(*1.5.31*)および(*1.5.32*)により，振動数が$(\nu,\nu+d\nu)$の範囲にあるエネルギー量子の数は

$$\frac{8\pi\nu^2L^3}{c^3}\frac{d\nu}{\exp(\beta h\nu)-1} \tag{1.5.40}$$

となる．さらにνの小さい極限では古典論的なRayleigh-Jeansの(*1.3.6*)の分布が再現されるべきことから，$\beta=kT$が出てくる．そこで(*1.5.40*)なる表式にエネルギー量子$h\nu$を掛けると，$L=1$なる場合には空洞輻射のエネルギー密度の分布に対するPlanckの分布式(*1.3.9*)が再現されることになる．

ここまでくると，光に対する電磁波的見地からの考察と，前節で述べたEinstein流の光量子説の間のギャップは大分縮まったと言えよう．そして上記の定常波の代りに進行波を置きかえ，そのおのおのを光量子と同定するなら，同じようなやり方で光量子の集まりのエネルギー分布として，Planck公式が導き出せることになる．

§1.6 原子の構造と量子論

前節までに論じたのは主として黒体輻射の問題の解明によって提示された自然現象の非連続性であった．それは作用量子h，エネルギー量子$h\nu$，あるいは光子によって特徴づけられた．そして，他の多くの現象において目立っていなかった非連続性が少しずつ顕わにされだした．たとえば1905年にEinsteinは固体の比熱が低温になると，Dulong-Petitの法則(*1.3.19*)であたえられる値より小さくなることを，固体の振動がPlanckの調和振動子と同じように量子化されているという仮説によって説明した．その後，Debye, Born-Kármánなどは固体の種々の固有振動を考慮した比熱の一般式を求め，実験とよく一致する結果に到達した．

しかし，量子論が次の大きな一歩を踏みだしたのは，Bohrによる原子構造の理論の成功によってであった．古典物理学の立場からの原子の構造の考察は，す

でに19世紀の末までに，いろいろと行われていた．しかし，明確な形での原子模型の提唱は20世紀に入ってからであった．そのひとつは1903年のJ. J. Thomsonの原子模型である．それによると，正電荷が一様に分布した球の中を負に帯電した電子が動きまわる．すると電子は3次元的調和振動子のように振る舞うから，その放出するスペクトル線は，振幅の大小にかかわらず一定の振動数を持つことになる．この点は原子がそれに特有な輝線スペクトルを持つことを理解するのには都合がよいが，水素その他の元素の実際のスペクトルの系列の説明はできない．また正に帯電した球体の各部分の間に斥力が働くのに，どうして安定性を保てるかの説明も困難である．これに対して，同じ年に長岡は中心に質量の大きな正電荷を持った粒子があり，その周囲に電子を配列させ，全体として安定した系をつくり得ることを示そうとした．この模型は次に述べるRutherford模型の先駆となったのである．よく知られている通り，1911年にRutherfordは放射性元素から出るα線が種々の原子によって，時々大きな角度で散乱されるのを説明するための原子模型を提唱した．それによると，原子の中に含まれるZ個の電子を除いた残りは，**原子核**としてZなる正の電気と原子の質量のほとんど全部を持って中心に集中している．Zは原子番号と呼ばれる整数である．原子核および電子の大きさは，原子全体の大きさに比して極めて小さいと推定されるから，Z個の電子相互の平均距離は電子自身の半径より遙かに大きく，したがって太陽と惑星の場合のように，電子は原子核を中心として，ある程度まで独立に周期運動を続けるであろう．ただし電子間のCoulomb斥力と原子核と電子の間のCoulomb引力との比は$1/Z$であり，惑星間の重力と太陽と惑星の間の重力との比m/Mほどには小さくない．したがって電子の軌道は楕円とは相当ちがった複雑なものになる．ただ水素原子の場合だけは次に述べるように簡単な楕円運動をしていると考えられる．このような考え方がどういう意味で正しいか，あるいは正しくないかを検討する前に一言して置きたいのは，この種の原子模型に現れた正負の電気と質量との間の関係の非対称性である．ずっと後になって，多種多様な素粒子の存在が知られるようになっても，この非対称性は残っていった．ただし量子力学では，粒子に対する反粒子という概念を導入することにより，通常の物質の世界に対して，正負の電荷の入れ換った反物質の世界を想定することができる．したがって物質と反物質の両者を併せて考えることによって，正負の電荷の対称性が

回復されると言えないこともない.

さて Rutherford の原子模型は太陽系と似ているが，最も大きな違いは，その不安定性にある．すなわち電子の運動に古典電子論が適用できるものとすると，運動の周期と同一の周期を持った——したがって，その逆数を振動数とする——電磁波が四方に出てゆくはずである．その結果，電子のエネルギーはだんだん減少し，それに伴って軌道も原子核の近くへと収縮してゆくし，また電子の運動の周期も短くなり，出てくる光の振動数は増加するであろう．これは一方では原子から出てくるスペクトル線が非常に広い幅を持つことを意味しており，各元素の出す光がそれぞれ一定の波長を持つ線スペクトルの系列になっているという事実と矛盾する．また他方では電子はだんだんと原子核に接近し，やがてはその中に落ちこんでしまうという運命を免かれないから，原子が非常に安定な存在であるという明白な事実さえ全く説明できない.

これらの点では，むしろ Thomson 模型の方がすぐれているが，しかしそれは原子核の存在という確かな事実と矛盾するし，また次に述べる原子のスペクトル系列に関する経験的法則の説明にも全く無力である．すなわち 1885 年に Balmer は水素のスペクトル線の系列の波長を $\lambda_3, \lambda_4, \cdots$ とした場合

$$\frac{1}{\lambda_n} = R\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{n^2}\right) \qquad (n=3, 4, \cdots) \tag{1.6.1}$$

なる経験法則が成立することを発見した．ただし R は Rydberg 定数と呼ばれ，大体の数値は

$$R \cong 1.1\times10^5 \quad (\mathrm{cm}^{-1}) \tag{1.6.2}$$

である．さらに Rydberg は多くの元素のスペクトル線の系列が近似的に

$$\frac{1}{\lambda_n} = A-\frac{R}{(n+\alpha)^2} \tag{1.6.3}$$

で表せることを示した．ただし n は正の整数で，A, α は系列によって異なる定数である．Ritz はこれをもっと一般化して，

$$\frac{1}{\lambda} = F_r(n_1)-F_s(n_2) \tag{1.6.4}$$

なる関係を設定した．ただし n_1, n_2 は整数で

$$F_r(n) = R/(n+\alpha_r)^2 \tag{1.6.5}$$

である．(*1. 6. 3*)ないし(*1. 6. 4*)は Balmer の法則(*1. 6. 1*)を特別の場合として含んでいる．ところが原子のスペクトル線の振動数 $\nu=c/\lambda$ が(*1. 6. 4*)ないし(*1. 6. 5*)のような2項の差の形で表されるという一般的事実は，古典電子論の立場からは到底説明ができない．なぜかといえば，この立場では電子の周期運動の振動数を ν_1 とすると，その座標を時間の関数として Fourier 級数で展開した場合に出てくるのは倍数的振動(higher harmonies)で，それらの振動数は $\nu_n=n\nu_1$ ($n=1, 2, \cdots$)に限られ，そこから出てくる光の振動数も，これらのどれかと一致しなければならない．そういう中に(*1. 6. 4*)などであたえられる振動数は含まれない．

これらの基本的な諸困難を克服するために，1913年に Bohr は次のような順序で新理論を展開していった．まず第1は Planck の量子条件(*1. 5. 9*)を水素原子内の電子の運動に適用することであった．この場合には $Z=1$ で，電子は1個しかないから，それが原子核による Coulomb のポテンシャル $-e^2/r$ の中では一般に楕円軌道を描くはずである．ただし r は原子核からの電子の距離を表す．とくに一番簡単な円運動の場合を考えて見る．軌道半径を a，回転の角速度を ω とすると，核からの引力と遠心力とが釣りあう条件は

$$e^2/a^2 = ma\omega^2 \tag{1.6.6}$$

である．回転角を θ，軌道に沿っての長さを q，運動量を p とすると

$$q = a\theta, \qquad p = ma\frac{d\theta}{dt} = ma\omega \tag{1.6.7}$$

であるから，円周に沿って(*1. 5. 9*)の積分を行うと

$$2\pi ma^2\omega = nh \qquad (n=1, 2, \cdots) \tag{1.6.8}$$

となる．ただし，この場合 $n=0$ は電子が原子核に落ちこんでしまった状態に対応するから除外しておくことにする．(*1. 6. 6*)と(*1. 6. 8*)とから可能な円軌道の半径として

$$a_n = n^2h^2/4\pi^2e^2m \qquad (n=1, 2, \cdots) \tag{1.6.9}$$

が得られ，これに対応する角速度は

$$\omega_n = 8\pi^3e^4m/n^3h^3 \qquad (n=1, 2, \cdots) \tag{1.6.10}$$

となる．これは図1.3で示すように，電子の運動が $n=1, 2, \cdots$ に対応する離れ離れの円軌道のどれかの上を動くように量子化されていることを意味する．それらの円の半径は $1^2:2^2:3^2:\cdots$ なる比率で増大するが，一番内側の円軌道の半径は

$$a_1 = h^2/4\pi^2 e^2 m = 5.28\times 10^{-8} \quad \text{(cm)} \tag{1.6.11}$$

となっている．これらの軌道上の電子のエネルギーは(*1.6.9*)および(*1.6.10*)により，それぞれ

$$W_n = \frac{1}{2}m(a_n\omega_n)^2 - \frac{e^2}{a_n} = -\frac{2\pi^2 e^4 m}{n^2 h^2} \qquad (n=1, 2, \cdots) \tag{1.6.12}$$

なる離散的な値を取る．

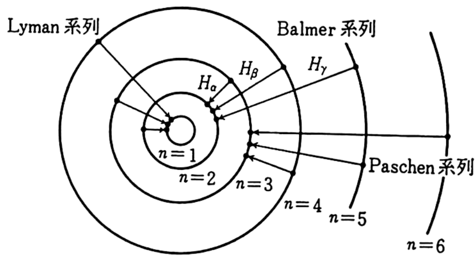


図 1.3 水素原子の円軌道とスペクトル系列

ところで古典電子論によればすでに繰り返し述べたように，これらの軌道上にある電子はその運動の周期に等しい周期の電磁波を出して，連続的にエネルギーを失うはずである．これが古典物理学的原子模型に共通の難点となっていた．そこで Bohr は量子条件の他にさらに次の新しい概念と条件とを導入することによって，古典的模型の難点を除去すると同時に，前述の Balmer, Rydberg, Ritz の経験法則をも説明しようとした．すなわちまず量子化された軌道のどれかにある電子は，連続的に電磁波を出すのではないという意味で，それらは**定常状態**にあり，ある定常状態から他の定常状態に非連続的に飛び移る場合にのみ，輻射エネルギーが放出されたり吸収されたりすると考える．そして，もしも電子の初めの状態のエネルギー W_n が，後の状態のエネルギー W_f より大きければ

$$h\nu = W_n - W_f \tag{1.6.13}$$

なる**振動数条件**であたえられる振動数 ν の光が放出され，逆にこの振動数の光を吸収して W_f なるエネルギーの状態から W_n なるエネルギーの状態に移り得ると考える．このような全く新しい仮定を採用すると，水素原子から出てくる光は確かに尖鋭な線スペクトルの系列となる．しかも，その周期は電子の運動の周期とは違っていて，振動数で表せば

$$\nu = \frac{2\pi^2 e^4 m}{h^3}\left(\frac{1}{f^2} - \frac{1}{n^2}\right) \tag{1.6.14}$$

となる．ただし$f=1, 2, \cdots$，$n=f+1, f+2, \cdots$である．これを経験式(*1.6.1*)と比較すると，$f=2$，$n=3, 4, \cdots$，

$$R = \frac{2\pi^2 e^4 m}{h^3 c} \tag{1.6.15}$$

と取れば，Balmer系列が得られることになる．実際，(*1.6.15*)の中に定数e, m, h, cの数値を代入すると，Rydberg定数の値は(*1.6.2*)とよく一致する．Balmer系列の場合は，可視光線の範囲にある$H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, \cdots$などのスペクトル線に対応しているが，$f=1$とおくと紫外線領域のLyman系列，$f=3$とおくと赤外線領域のPaschen系列が得られる(図1.3参照)．

さらに定常状態という概念の導入によって，Rutherford模型に欠けていた元素の安定性も復活させられた．なぜかといえば，電子が$n=1$なる最も低いエネルギーの状態，すなわち基準状態に落ちついてしまえば，それはもはや輻射によってエネルギーを失う心配がない．外部からエネルギーを吸収しない限り，いつまでも円運動を続けるであろう．このようにして自然現象の経過の非連続性を象徴していた作用量子hの存在は，同時にまた原子の壊滅を防ぎ，物質世界を安定に保つ支柱でもあったことが明らかとなったのである．

1914年になるとFrankとHertzは電子衝突の実験によって，量子条件および振動数条件の妥当性の直接の証拠を提供した．すなわち水銀蒸気に電子を衝突させた場合，電子に加える電圧Vが

$$eV = h\nu \tag{1.6.16}$$

であたえられる値に達すると，初めて水銀の原子は振動数νなるスペクトル線を放出するようになる．これは第1に，衝突する電子のエネルギーeVが$h\nu$に達しなければ水銀原子の状態に変化が起こらないこと，いいかえれば基準状態と次の一番低い**励起状態**の間には有限のエネルギーの隔たりがあることを示している．第2にこのエネルギー差が振動数条件(*1.6.13*)を満足する光のエネルギーに変わることを示している．

その後，Bohr, Sommerfeld, Wilson，石原などは，上述の根本仮定をいろいろな方向に拡張することを試みた．まず第1に量子条件を2ないしそれ以上の自

由度を持つ力学系の周期運動——いわゆる**多重周期運動**——に一般化することによって，楕円軌道の量子化に成功した．その場合，(*1.6.12*)に出てくる，いわゆる**主量子数** n のほかに，**方位量子数** l および**磁気量子数** m が新たに導入された．ただし，それらは

$$l=1,2,\cdots,n;\qquad m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l \tag{1.6.17}$$

なる整数値に限られる．さらに，このような考察を水素以外の原子に適用すると，いろいろな元素から出てくるスペクトル線の一般的特徴が理解でき，Rydberg や Ritz の経験法則に理論的基礎づけをあたえることができる．そしてまた，原子番号 Z なる原子の中の Z 個の電子がより低いエネルギー準位から順々に，定常状態を占居していくものとすると，元素の物理的・化学的諸性質が Z とともにある周期性を持って変わること，すなわち元素の周期律を説明することに成功した．ただし，そのためには§1.2で述べた電子のスピンによる**スピン量子数**という概念，および**排他律**を付加することが必要であった．後者は1925年に Pauli によって導入されたが，それは同一の軌道，すなわち量子数 (n,l,m) が同一で，しかもスピンの方向まで同じ状態には，電子は1個しか入れないことを意味していた．

§1.7　量子力学の発端

さて古典物理学から量子力学への第3の，そして最後の大きな飛躍は，一方では de Broglie と Schrödinger，他方では Heisenberg によって，ほとんど同時に行われたが，本節ではまず，前節の Bohr 理論との関連のより密接な Heisenberg 理論について述べよう．古典電気力学によると，電子が力の中心のまわりで T なる周期の周期運動をしている場合，簡単のため x 方向の座標だけを考え，それを $q(t)$ とすると，それは時間 t の関数として

$$q(t)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}c_n\exp(2\pi in\nu t) \tag{1.7.1}$$

なる形に Fourier 展開ができる．ただし $\nu=1/T$ で，x が実数であるためには，c_n と c_{-n} とはたがいに複素共役な数でなければならない．この電子が単位時間に放出する輻射のエネルギーを一周期について平均すると

$$\frac{2e^2}{3c^3}\overline{\left(\frac{d^2q}{dt^2}\right)^2} \tag{1.7.2}$$

となるが，(1.7.1)を代入すると，(1.7.2)の中で振動数が $n\nu$ $(n=1, 2, \cdots)$ なる輻射のエネルギーは

$$\frac{4e^2}{3c^2}|c_n|^2(2\pi n\nu)^4 \tag{1.7.3}$$

であることが容易にわかる．

ところが一方，量子論によると，原子から放出される光の振動数は(1.6.13)の条件できめられるから，それは一般に電子の運動の振動数 ν あるいは，その整数倍とは一致しない．そして光の放出または吸収される機構についても，古典電気力学とは全く違った考え方をする．すなわち量子論ではひとつの軌道から他の離れた軌道への飛び移りに伴って，有限の大きさの光のエネルギーが発生または消滅すると考えるのである．Planck の熱輻射理論において取り扱われた調和振動子の場合には，たまたまその振動数が光の振動数と一致し，しかも振幅によって振動数が変わることがなかったから，量子論と古典論の相違があまりはっきり現れなかったのである．また古典論的な Thomson の原子模型が量子論的な模型とある種の類似性を持ち得たのも同様な理由からであった．

そこで1916年に Einstein は古典論から脱却して，軌道間の量子論的遷移を，もはやこれ以上は分析できない**素過程**と見なす立場を取った．すると問題となるのは遷移の細かい機構でなく，その確率である．これを決定する法則は放射性原子核の場合との類推から，次のようなものであろうと考えられる．すなわち時刻 t において量子数 n なる定常状態にある原子の数を $N_n(t)$ とすると，振動数条件(1.6.14)にしたがって，その中で dt 時間の間に低いエネルギーの状態 f に落ちるとともに振動数 ν なる光を放出するような原子の数は，N_n および dt に比例し

$$A_f^n N_n dt \tag{1.7.4}$$

なる形であると仮定する．これは原子が外部からの影響に関係なく，自然的に遷移を行うことを意味するから，A_f^n なる比例定数を**自然遷移確率係数**と呼ぶ．

次に振動数 ν の光がすでに存在している場合には，原子はそれを吸収して，逆に状態 f から n へ移ることが可能である．そこで振動数が $(\nu, \nu+d\nu)$ の範囲にある輻射のエネルギー密度を $u_\nu d\nu$ とし，時刻 t において状態 f にある原子の数を

N_f とすると，その中で dt 時間に f から n へ移る原子の数は，N_f, u_ν および dt に比例すると考えられるから，

$$B_n{}^f N_f u_\nu dt \qquad (1.7.5)$$

と書ける．これが**誘導吸収**である．ところで古典電子論によると，外部の輻射によって電子の強制振動が生じた場合，振動の位相によっては，逆に外部へエネルギーを発散する，いわゆる**誘導放出**の過程も起こり得る．これに対応して量子論でも，振動数条件を満たす振動数 ν の光子がすでに存在する場合，これと同じ振動数の光子を放出して状態 n から f へ移る原子の数は

$$B_f{}^n N_n u_\nu dt \qquad (1.7.6)$$

と書けるものとする．係数 $B_f{}^n$ および $B_n{}^f$ は**誘導遷移確率係数**と呼ばれる．

とくに原子および輻射の全体が熱平衡の状態にあるとすると，n から f へ移る原子の数と，逆に f から n へ移る原子の数とは等しくなければならないから，(1.7.4), (1.7.5), (1.7.6) から

$$N_n(A_f{}^n + B_f{}^n u_\nu) = N_f B_n{}^f u_\nu \qquad (1.7.7)$$

が成立するはずである．そこで原子数のエネルギー分布に関しては古典統計力学的な Boltzmann 統計が成立しているものとすると

$$N_n : N_f = \exp(-W_n/kT) : \exp(-W_f/kT) \qquad (1.7.8)$$

となり，これと (1.7.7) および (1.6.13) から直ちに

$$u_\nu = \frac{A_f{}^n / B_f{}^n}{(B_n{}^f / B_f{}^n)\exp(h\nu/kT) - 1} \qquad (1.7.9)$$

が得られる．そこで前と同じように，振動数 ν の小さい極限——すなわち量子エネルギー $h\nu$ を 0 に近づけた極限——においては，古典電気力学から得られる Rayleigh-Jeans の公式 (1.3.6) が成立するものとすると，

$$A_f{}^n / B_f{}^n = 8\pi h\nu^3/c^3, \qquad B_n{}^f = B_f{}^n \qquad (1.7.10)$$

なる関係が得られる．これを (1.7.9) に代入したものは，またしても Planck の公式 (1.3.9) と全く同形になる．しかし，だからといって (1.7.9) が黒体輻射の式をそのまま再現していると即断してはならない．なぜかといえば，原子の集団の離散的なエネルギー準位の差として振動数条件 (1.6.13) であたえられる光の振動数は一般に離散的であるから，黒体輻射の場合には，そのまま対応させることはできない．

しかし，この点を立ち入って論じるのはやめる．なぜかといえば，ここでもっと注目すべき点は，A_f^n, B_f^n, B_n^f などの遷移確率係数が一般的にあたえられているだけで，それらをきめる具体的方法が容易に見出せないことにあるからである．ここで量力論はひとつの行きづまりに逢着した．それ以後，量子力学へ到達するまでの道は紆余曲折していたが，その間において，道しるべとなったのは Bohr の**対応原理**であった．それはできあがった理論体系の一部ではなく，むしろ従来の理論にできるだけ密接することによって，できるだけ着実に新しい理論を築いて行こうという指導精神のごときものであった．それゆえ，その的確な表現は困難であるが，おおよそ次のようなものである．

周期運動をしている電子が，量子数 n なる状態から n' なる状態へ遷移を行った場合，n および n' が大きく，それらに比してその差 $\Delta n=n-n'$ が小さかったとすると，古典論が近似的に成立するであろうと考えられる．そこで簡単のために自由度1なる場合について，古典論的にきめられた道に沿って一周する積分

$$J=\oint pdq \tag{1.7.11}$$

を考える．この J は各軌道について一定の値を持つ量であるが，古典力学では作用変数と呼ばれている．すると振動数条件

$$\nu=(W_n-W_{n'})/h \tag{1.7.12}$$

の中の量子化されたエネルギー $W_n, W_{n'}$ は，上記の古典論的極限では $J_n=nh$ が連続的に変わるものとして，エネルギー W を J の関数とすると，(*1.7.12*)は

$$\nu_{\Delta n}\cong\Delta n(dW(J)/dJ) \tag{1.7.13}$$

と書いてもよい．

このような極限においては，放出される輻射の強さについても量子論と古典論とが一致するものと考えると，単位時間に放出される $\nu_{\Delta n}$ なる振動数の光のエネルギーは(*1.7.3*)の代りに

$$\frac{4e^2}{3c^3}|c_{\Delta n}|^2(2\pi\nu_{\Delta n})^4 \tag{1.7.14}$$

とも書ける．このような置きかえをすれば，光の強さおよび偏りを古典論的に決定し得ることになる．最も簡単な例として1次元の調和振動子を取ると，その座標 q は(*1.5.3*)，すなわち

$$q = (1/2i)\{\exp[2\pi i\nu(t-t_0)]-\exp[-2\pi i\nu(t-t_0)]\} \qquad (1.7.15)$$

なる形をしているから，これを(*1.7.1*)と比較すると，

$$\Delta n = n-n' = \pm 1 \qquad (1.7.16)$$

なる場合だけ，係数 $c_{\Delta n}$ が0にならないという結論がでてくる．したがって調和振動子から出てくる輻射の振動数は ν だけに限られ，その際の量子数 n の変化も ± 1 だけに限られることになる．この結果はもともと n および n' が大きい領域だけで成立するはずであるが，調和振動子の場合には，その振動数と出てくる光の振動数とが一致するという特殊事情があって，すべての量子数に対して**選択規則**(*1.7.16*)が成立する．実際この規則は後章で述べるように，量子力学から導き出すことができるのである．

しかし，調和振動子の場合は例外であって，一般には量子論的な遷移は，いつも前後ふたつの異なる定常状態に関係しているから，これを古典力学的な軌道のどれかひとつに対応させることは本来無理である．したがって正しい対応関係を設定するためには，今までとよほど違った立場に移行しなければならないであろう．1925年に到って遂に Heisenberg がこれに成功した．その際，彼はまず従来の量子論のように，古典力学の諸概念および方法と，量子条件や振動数というこれと異質的なものとを，そのまま結びつけることを断念した．そして原子内における電子の位置とか，軌道を1周する時間とかを，物理的に意味のある量と認めないという立場を取ることにした．当時の Heisenberg は，これらの量を直接観測によって決定することは不可能であるから，それらを含んだ理論の結果がある場合に実験と合致したのは，むしろ偶然であったろうと考えた．そして原子に関してわれわれの確かに知り得る量は，それから出てくる光の振動数，強さ，偏りだけであるという極端な意見を述べた．ただし，彼自身も後には，もっと穏かな考え方に戻っているが，ここでの当面の問題は光の振動数，強さ，偏りの間の関係を導きだすことであった．それにはまず Bohr 理論をそのまま採用して，原子が量子数 n なる状態から $n-\alpha$ なる状態へ移る際に出てくる光の振動数を

$$\nu(n, n-\alpha) = \frac{W(n)-W(n-\alpha)}{h} \qquad (1.7.17)$$

という形に書いてみる．すると直ちに

$$\left.\begin{array}{l}\nu(n, n-\alpha)+\nu(n-\alpha, n-\alpha-\beta)=\nu(n, n-\alpha-\beta) \\ \nu(n, n-\beta)+\nu(n-\beta, n-\alpha-\beta)=\nu(n, n-\alpha-\beta)\end{array}\right\} \qquad (1.7.18)$$

すなわち同種の原子からでる種々のスペクトル線の間に成立する経験法則としての **Ritz の結合原理**が出てくる．ところですでに述べたように古典論では原子の中にある電子の位置を表す座標 $q(t)$ は(1.7.1)のように，Fourier 展開ができる．しかし量子論でも，これと同様に

$$q(t)=\sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} q_{\alpha} \exp [2\pi i\nu(n, n-\alpha) t] \qquad (1.7.19)$$

と書くのは具合いがわるい．なぜかといえば，他の任意の物理量 r をやはり

$$r(t)=\sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} r_{\alpha} \exp [2\pi i\nu(n, n-\alpha) t] \qquad (1.7.20)$$

なる形に展開したとすると

$$q(t) r(t)=\sum_{\alpha, \beta} q_{\alpha} r_{\beta} \exp [2\pi i\{\nu(n, n-\alpha)+\nu(n, n-\beta)\} t] \qquad (1.7.21)$$

となり，そこに現れる振動数は Ritz の結合原理から要求される(1.7.18)とは全く違ったものになるからである．

そこで上記の Fourier 展開を断念し，(1.7.19)の代りに

$$q_{\alpha} \exp [2\pi i\nu(n, n-\alpha) t] \qquad (-\infty \leqq \alpha \leqq+\infty) \qquad (1.7.22)$$

の全体で $q(t)$ を表すことにする．ところが量子数 n 自身も α と同様に，もともと種々の整数値を取り得たのであるから，それらの全部を考慮すると

$$q_{n, n-\alpha} \exp [2\pi i\nu(n, n-\alpha) t] \qquad (-\infty \leqq n, \alpha \leqq+\infty) \qquad (1.7.23)$$

の全体で $q(t)$ が表現されるとする方が，より適当である．すると(1.7.20)も同様にして

$$r_{n, n-\alpha} \exp [2\pi i\nu(n, n-\alpha) t] \qquad (1.7.24)$$

で置きかえられることになる．そこでさらに q と r の積 qr に対しては(1.7.20)の代りに

$$\sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} q_{n, n-\alpha} r_{n-\alpha, n-\alpha-\beta} \exp [2\pi i\{\nu(n, n-\alpha)+\nu(n-\alpha, n-\alpha-\beta)\} t] \qquad (1.7.25)$$

と取るならば，そこには Ritz の結合原理(1.7.18)に適合した振動数だけが現れ，(1.7.25)は

$$\sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} q_{n,n-\alpha} r_{n-\alpha,n-\alpha-\beta} \exp\left[2\pi i\{\nu(n, n-\alpha-\beta)\}t\right] \tag{1.7.26}$$

と書けることになる．

このような掛け算の規則は，代数にしばしば出てくる**行列**(matrix)に対するものと同型である．すなわち(*1.7.23*)においてnの代りにαと書き，$n-\alpha$の代りにβと書いて，それらをそれぞれ行および列の番号を示す添字と見なし，その全体が

$$\boldsymbol{q} = \{q_{\alpha,\beta}(t)\} \tag{1.7.27}$$

なる行列を形づくるものとする．ただし

$$q_{\alpha,\beta}(t) \equiv q_{\alpha,\beta}{}^{(0)} \exp\left[2\pi i\nu(\alpha, \beta)t\right] \tag{1.7.28}$$

で，$q_{\alpha,\beta}{}^{(0)}$は時間を含まないとする．同様にして$\boldsymbol{r}$に対する行列を

$$\boldsymbol{r} = \{r_{\alpha,\beta}(t)\} \tag{1.7.29}$$

と書くと，それらの積は

$$\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r} = \left\{\sum_{\gamma} q_{\alpha,\gamma} r_{\gamma,\beta}\right\} \tag{1.7.30}$$

となるが，これは行列の積に他ならない．ここで積の順序を変えて

$$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{q} = \left\{\sum_{\gamma} r_{\alpha,\gamma} q_{\gamma,\beta}\right\} \tag{1.7.31}$$

なる行列をつくってみると，それは一般に$\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}$とは異なる行列となる．

そこでHeisenbergは量子論においては，物理量は単一の数ではなく，上記のように無限に多くの行と列とを持った行列として表され，したがって掛け算に関する交換の法則が成立しないという全く新しい仮定から出発すべきことを提唱した．これは対応原理の精神にしたがって進んでゆく途中における，それからの大きな逸脱であった．Bohrはあるパーティのあとで皿を洗いながら“よごれた皿をよごれた水で洗っているうちに，だんだん皿がきれいになる”と言ったと伝えられているが，対応原理はまさによごれた水であった．Heisenbergは新鮮な水を見つけることによって皿をすっかりきれいにしたのだとも言えよう．それから間もなく彼はBorn, Jordanと協力して，**行列力学**，すなわち狭義の量子力学を発展させた．他方においてDiracはHeisenbergの考え方に立脚して，掛け算に対する交換の法則の成立しないような数，すなわちq数なるものを想定し，同

様な理論を展開した．それらはしかし，やがて波動力学をも含む広義の量子力学の特別の表現形式であることが判明したが，それについては次の節および次の章以下で改めて詳しく論じられるであろう．

§1.8 電子の波動性の発見

古典物理学から量子力学への第3の飛躍は，前節で述べたHeisenbergの行列力学への移行とは全く違った方向からも行われた．すなわち，1924年に，de Broglieは電子のような物質粒子にもまた，光と同じように粒子と波動の二重性を認めるべきであるという大胆な考えを発表したのであった．彼はまず光子のエネルギーと振動数に関するEinsteinの関係(*1.4.1*)が電子のような物質粒子に対しても成立するものと仮定した．すなわち特殊相対論によれば，静止している電子はmc^2なる固有のエネルギーを持つから

$$mc^2 = h\nu_0 \tag{1.8.1}$$

であたえられる振動数ν_0の振動を伴うと考えた．その波の形はたとえば

$$\psi = a\sin 2\pi\nu_0 t \tag{1.8.2}$$

と書けるであろう．ただしaは振幅を表す定数である．そこでLorentz変換によって，座標系(t, x)に対して$-x$方向にvなる速さで動いている座標系(t', x')に移ると，

$$t = (t'-vx'/c^2)/\sqrt{1-v^2/c^2}, \qquad x = (x'-vt')/\sqrt{1-v^2/c^2} \tag{1.8.3}$$

なる関係が成立する．この新しい座標系(t', x')から見れば，電子はx方向にvなる速さで走っていることになる．これに伴う振動(*1.8.2*)も

$$\psi = a\sin\left[2\pi\nu_0(t'-vx'/c^2)/\sqrt{1-v^2/c^2}\right] \tag{1.8.4}$$

となり，これは電子の進行方向に進む平面波となる．この波の振動数νと電子のエネルギーWの間には

$$W = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = h\nu \tag{1.8.5}$$

なる関係が存在し，これは光の場合の(*1.4.1*)に対応しているが，電子の運動量pと波の波長λの間にも

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}} = \frac{h}{\lambda} \tag{1.8.6}$$

なる関係が存在することが，(*1.8.4*)と(*1.8.1*)から直ちにわかる．これは光の場合の(*1.4.3*)なる関係式に対応している．

ところが，この波の伝わる速さ，すなわち位相速度は

$$u = \lambda\nu = c^2/v \qquad (1.8.7)$$

で，vは常にcより小さいから，uは常にcより大きくなる．そこでde Broglieは，この波自身は何か実在的なものを表しているのでなく，粒子としての電子の運動を導くものという意味で**位相波**と名づけた．それはしばしば**物質波**あるいは**de Broglie波**とも呼ばれる．しかし古典力学でよく知られているように，一定の波長λの平面波だけでなく，これと少しく波長の異なる波を重ねて波群をつくると，その全体としての山の伝わってゆく速さ，すなわち**群速度**は$d\nu/d(1/\lambda)$であたえられる．de Broglie波の場合に(*1.8.5*)，(*1.8.6*)から群速度を計算すると

$$d\nu/d(1/\lambda) = dW/dp = v \qquad (1.8.8)$$

となり，電子の粒子としての速度と一致する．それゆえ，粒子そのものと位相波からつくった波群との間には密接な関係がある．この関係の本当の意味は，Schrödingerの波動力学を経てBornの確率解釈に到達するまで，なかなかわからなかったのであるが，それらについては後でだんだんと論じられるであろう．

さてde Broglieが位相波という概念を持ちこんだ直接のねらいは原子内の電子の軌道の量子化に，波動論的解釈をあたえることにあった．簡単のために電子が半径aなる円軌道の上を動いているとすると，それに伴うde Broglie波があるはずであるが，その波長λの整数倍がちょうど円周の長さになっている場合にのみ，定常波ができると考えられる．その条件は

$$2\pi a = n\lambda \qquad (n=1, 2, \cdots) \qquad (1.8.9)$$

であるから，運動量pと波長の関係(*1.8.6*)を代入すると，直ちに

$$\oint p\,dq = 2\pi ap = nh \qquad (1.8.10)$$

が得られるが，これは量子条件(*1.5.9*)に他ならない．こういう場合だけがBohrの定常状態に対応することになり，電子の運動の量子化ということは，これに伴う位相波の干渉による定常波の成立と見直せる．しかし波動論の立場から見るならば，当然，3次元的にひろがった波を問題にしなければならない．すでに述べたように，電子の自由運動の場合には平面波が対応していた．そんなら水素原子

の中の電子の運動に伴って，どのような波が空間にひろがっているのか，それをきめるのが次の問題になる．

しかし，この問題に立ち入る前に，電子の波動性の実験的証明について簡単に述べておきたい．電子が V なる電圧で加速されたとし，それによって得た速度 v が c に比して小さかったとすると

$$\frac{1}{2}mv^2 = eV \qquad (1.8.11)$$

であるから，これに伴う de Broglie 波の波長は (*1.8.6*) から

$$\lambda = h/mv = h/\sqrt{2meV} \qquad (1.8.12)$$

となる．電圧 V をボルトを単位として測ったとすると

$$\lambda = \sqrt{\frac{150}{V}} \times 10^{-8} \quad (\mathrm{cm}) \qquad (1.8.13)$$

であるから，電極間の電位差が数十ないし数百ボルト程度の陰極線に伴う de Broglie 波の波長は，短波長の X 線の程度になる．したがって，X 線と同じように結晶によって回折されることが予期される．実際 Davison と Germer は 1927 年に陰極線のニッケルの単結晶による反射に際して，X 線の場合の Bragg 反射に似た結果を得た．さらにまた G. P. Thomson は多結晶の薄い金箔を通過する陰極線による，X 線の場合の Debye-Scherrer 環に相当する回折像を得たし，菊池は薄い雲母箔によって，X 線の場合の Laue 斑点に類似した写真を撮影することに成功した．これらの実験によって de Broglie 波の波長と運動量の間の関係 (*1.8.13*) が正しいことが確かめられると共に，電子の波動性はもはや疑いようのないものとなったのである．

それなら，なぜそれまで電子の粒子性ばかりが目立っていたかといえば，それは de Broglie 波の波長が巨視的な長さに比しても，さらには光の波長に比してさえも，いちじるしく小さかったからである．さらに電子以外の物質粒子についても同様に de Broglie 波が伴っていると考えられるが，その波長は (*1.8.6*) で示されるように，質量に逆比例して短くなるから，その波動性は全く目につかなくなってしまうわけである．これはちょうど光の通路にある媒質の屈折率が，光の波長の程度の長さの領域ではほとんど均一であると見なし得る限り，その波動性を考慮する必要がなく，光線に対して幾何光学を適用すればよかったのと似てい

る．ところが今や問題は，光の場合に幾何光学では話がすまず，一般には波動光学へ移行する必要があったのと同じように，古典力学から**波動力学**ともいうべきものへ移行することにある．自由電子の場合には，それは(*1.8.4*)のような平面波を想定することであったが，この種の平面波を表す波動関数 $\psi(x, y, z, t)$ は

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}-\frac{1}{u^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=0 \qquad (1.8.14)$$

なる波動方程式を満足している．ただし u は(*1.8.7*)であたえられ，波動の伝わる位相速度を表す．

ところで，もっと一般に粒子に外力が働いている場合には，速度 v は粒子の占める位置によって違ってくるであろう．とくに外力がポテンシャル $V(x, y, z)$ を持つ場合に限ると，粒子の全エネルギー

$$W=\frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}+V \qquad (1.8.15)$$

は一定で，運動量の絶対値

$$p=\frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}}=\frac{1}{c}\sqrt{(W-V)^2-(mc^2)^2} \qquad (1.8.16)$$

の方が場所によって違ってくる．この場合にも de Broglie の関係式(*1.8.5*)および(*1.8.6*)が成立するものとすると，物質波の伝わる速度は

$$u=\lambda\nu=W/p \qquad (1.8.17)$$

となり，これも場所によって違ってくる．ということは，外力が働いている場合には，粒子の運動に伴う物質波は屈折率がポテンシャルによって変わる不均質な媒質中を伝わる波と見なせることを意味する．この場合にも全エネルギーが保存されているから，物質波の振動数 ν は一定となる．これに対応して波動関数 $\psi(x, y, z, t)$ は $\sin(2\pi\nu t)$，$\cos(2\pi\nu t)$，あるいは

$$\exp(2\pi i\nu t), \qquad \exp(-2\pi i\nu t) \qquad (1.8.18)$$

のような時間因子をふくむと考えられるが，いずれにしても

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=-(2\pi\nu)^2\psi=-(2\pi W/h)^2\psi \qquad (1.8.19)$$

が成立し，(*1.8.14*)は(*1.8.17*)と(*1.8.16*)とから

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\left(\frac{2\pi}{hc}\right)^2\{(W-V)^2-(mc^2)^2\}\psi=0 \quad (1.8.20)$$

とも書けることになる．$\psi(x, y, z, t)$ から時間因子を除いたものを $\psi(x, y, z)$ とすると，これも同じ(*1.8.20*)を満足する．

そこで粒子の速度 v は常に c に比して小さく，ポテンシャルの絶対値 $|V|$ も到るところ mc^2 にくらべて小さい場合，すなわち非相対論的近似の成立する場合には，(*1.8.15*)であたえられる全エネルギー W は mc^2 に近いから

$$W = mc^2 + E \tag{1.8.21}$$

と置くと，E は非相対論的な力学におけるエネルギーに対応することになる．E の絶対値は mc^2 にくらべて小さいから，近似的に

$$(W-V)^2-(mc^2)^2 \cong 2mc^2(E-V) \tag{1.8.22}$$

が成立する．したがって(*1.8.20*)は近似的に

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\psi = 0 \tag{1.8.23}$$

と書ける．これは Schrödinger が1926年に見出した **Schrödinger 方程式**に他ならぬ．ただし彼はこの式を導きだすのに，最初から非相対論的な場合を考え，古典力学における Hamilton-Jacobi の偏微分方程式を修正して，波動方程式の形に書き直すという手法を取った．いずれにしても，次の決定的な問題は実際に Schrödinger 方程式を，水素原子その他の重要な場合に解くことにあるが，それについては次の章で詳しく述べられるであろう．

§1.9　量子力学の成立とその後の発展

前2節で述べたように，Heisenberg などの代数的な方法による量子力学と，de Broglie, Schrödinger の解析的方法による波動力学とが，ほとんど同時に登場したが，間もなく両者が数学的に全く同等であることが Schrödinger などによって証明された．これによって広義の量子力学の数学的形式はひとつにまとまったのであるが，その物理的な解釈については，両者の間にまだ大きな隔たりが残っていた．すなわち Heisenberg が量子論を古典論から区別する重要な特徴のひとつである，自然現象の非連続性に基づく非直観的な要素を重要視したのに対して，Schrödinger は物質現象をすべて時間的にも空間的にも連続的な波動関数の変化として理解できると考えた．ところが1926年に Born は粒子の衝突の問題を波動力学的に取り扱い，その場合の波動関数の変化をそのまま実在する物質の

変化と同定するわけにいかないことを示した．たとえば，粒子Aが粒子Bに衝突した場合，——Bの質量がAの質量よりずっと大きかったとすると——Aのふるまいを表す波動関数は，入射波と散乱波の重なったものとなる．散乱波は四方八方にどこまでも拡がってゆくであろうが，これをたとえば電子のような粒子が空間に拡散してしまったと考えることはできない．なぜかといえば，電子の位置の測定をやれば，やはりどこかに局在することが判明するに違いないからである．この難点を克服するために，Schrödinger は**波束**なるものを想定した．すなわち電子の粒子としての局在性を表現するものとして，空間の小さな領域以外では振動が小さくなっている波動関数を考えた．しかし，次の章で論じられるであろうように，それがある時刻において波束をつくっていたとしても，その形は Schrödinger の波動方程式にしたがって変化し，遅かれ早かれ空間全体にひろがった波になってしまう．それゆえ，この種の基本的な困難を救うには，Born にしたがって，波動関数は粒子そのものではなく，その存在の確率——より正確には**確率振幅**——を表現していると解釈するほかはない．さらに1927年には Heisenberg の**不確定性原理**の発見，Bohr の**相補性**の考え方の提唱などによって，量子力学の正統的な解釈が成立することになった．また他方では，Dirac および Jordan による**変換理論**の展開，Neumann の Hilbert 空間の導入による厳密化などがあって，量子力学の数学的形式も整備されていった．これらについては，本巻の次章以下において，詳しく述べられるであろう．

この間に，量子力学はいろいろな方面——物理学だけでなく化学の領域にまで——広く応用され，いずれの場合にも予想以上の成功を収めてきた．たとえば，原子スペクトルや分子スペクトル，あるいは化学結合の理論の確立などがある．その場合，古典物理学には見られなかった群論を使う代数的方法が有効性を発揮した．また量子力学は固体論という大きな分野の開発に役立った．さらにまた古典統計力学とは本質的に違った**量子統計力学**を基礎づけることができた．その場合，**Bose-Einstein 統計**および **Fermi-Dirac 統計**は，それぞれ同種粒子から成る量子力学系の多次元空間内の波動関数の対称性と反対称性とに対応づけることができたのである．

ところで量子論は相対論と早くから密接な関係にあった．このことは§1.4で述べた Compton 効果の解釈や，§1.8で述べた de Broglie の物質波の理論など

に明瞭に現れているが，その他にもたとえばSommerfeldは水素原子内の電子の軌道の決定に特殊相対論の影響を考慮することによって，水素スペクトルの微細構造の説明に成功した．量子力学の段階に入ってからは，1928年にDiracが相対論的電子論で大きな成功を収めた．非相対論的量子力学から相対論的量子力学への移行において，もうひとつ注目すべきは**第2量子化**という手続きであった．すなわち上に述べたように，Schrödinger理論では多くの粒子から成る系の状態は多次元空間内の波動関数で表されるが，そのままでは空間座標と時間座標の間の対称性が見失われ，相対論への移行が困難である．ところが1927年にDirac, Jordan, Klein, Wignerなどは，同種粒子から成る系の場合には，1粒子に対する3次元的波動関数自身を量子力学的演算子と見直し，それに対する適当な交換関係を設定するという第2量子化の方法を展開した．すると演算子の間の簡単な交換関係，ないし反交換関係を仮定した場合が，それぞれBose統計およびFermi統計に対応することが証明できる．とくに光子はBose粒子と見なし得るが，この場合は§1.5で述べたDebyeの空洞輻射の量子化の手続きの，量子力学への移行と見なすことができる．1929年になるとHeisenbergとPauliは電磁場と電子の間の相互作用のある場合について，両者を共に第2量子化することによって，相対論的な量子電気力学の体系を建設した．

このあたりで量子力学は一応行きつくところまで行きついたのであるが，1932年ごろから中性子や陽電子や中間子の発見や原子核の人工壊変の成功などが大きな契機となって，量子力学をさらに原子核，宇宙線，素粒子の世界にまで適用範囲を拡げようとする努力が盛んになってきた．しかし，ここにはまだ根本的に未解決の問題も多く，量子力学自体にも，何らかの変革が必要とされると予想される状態にあるが，それは本講座第10巻『素粒子論』で論じられるべき課題であろう．

第Ⅱ部　量子力学の構成

はじめに

古典物理学から量子力学への歴史的道筋を辿った第I部の後を受けて，この第II部ではいよいよ量子力学の建設に取りかかる．第1章で述べた数多くの量子現象の発見およびそれに関する仮説や推論の発展は，紆余曲折に富んで，科学史上稀に見るほどの劇的な展開を見せ，時に感動的でさえあるが，必ずしも量子力学への最短コースを与えるものではない．第2章と第3章では歴史的発展にとらわれずにそれを整理し，量子力学にとって最低限必要であり，しかも不可欠な経験事実を洗い出し，それだけを基にして帰納的に量子力学の理論体系を組み上げてゆくことを試みよう．第1章で見たように，歴史的には量子力学への導入路はふたつあった．ひとつは波動力学からはいる道であり，もうひとつは行列力学からの道であった．われわれがここで選んだ導入路は波動力学から量子力学へ進む道である．この道に沿って見れば，行列力学は，量子力学の構成が完成した後その理論体系の枠内において，量子力学のひとつの表現形式として導き出されるはずのものとなろう．

第4章では，さらに進んで量子力学の帰納的建設に必要であった論理上の足場や状況説明を清算し，純化された理論体系としての量子力学を提示する予定である．ただし，数学的に立ち入った議論は『量子力学II』第V部にまわす．

第2章　波動力学の導入

§2.1　粒子と波動の二重性——量子力学建設の基礎におくべき実験事実は何か

第1章で述べた量子現象についての重要な発見または仮説は，行列力学を除外すれば，Planck の量子仮説，光の粒子性の発見，原子構造に関する Bohr の古典量子論，de Broglie の物質波仮説の4項目にまとめることができよう．第1章で説明したように，量子現象を解明する手掛りはまず量子条件(*1. 5. 9*)によって与えられた．量子条件(*1. 5. 9*)を設定しそれを基にして推論を発展させてゆけば，ほとんどすべての量子現象——とくに上記の最初の3項目に盛られている量子現象はすべて一応の理解が得られる．事実，空洞輻射や固体の比熱などの現象を本質的に解明した調和振動子エネルギーに対する Planck の公式(*1. 3. 20*)は，量子条件(*1. 5. 9*)に調和振動子の特性を導入しさえすれば，容易に導き出すことができる．この量子条件は，また，光の粒子性の根源と考えてよい．電磁波動は調和振動子の集団と等価であり，各振動子のエネルギーが量子条件(したがって，Planck 公式)の与える量子性をもつが，これを基にして光の粒子説が成立したのである．さらに Bohr の古典量子論においては，この量子条件が原子の‘定常状態’の選出という飛躍的に重要な任務を与えられて，水素原子などのエネルギー準位および原子スペクトルの解明に中心的な役割を演じたのであった．この意味で，量子条件(*1. 5. 9*)は量子現象の本質を集約したものであるといってよい．しかし，量子条件の設定それ自身はまことに唐突であって，de Broglie 仮設の出現まで，この条件を必要とする真の理由については何もわからなかった．量子条件の根源と由来を内容的に説明しながら，量子条件そのものを導き出して見せたものが de Broglie 仮説である．de Broglie 仮説は物質粒子にも光と同じような粒子と波動の二重性を与えようとするものであったが，電子などの物質粒子が波動

性をもつことはその後——量子力学建設後ではあったが——実験的に確かめられている．したがって，物質粒子や光が粒子と波動の二重性をもつという‘実験事実’だけを基にして，すべての量子現象が解明されるはずである．私達は歴史的順序を無視し，はじめにこの‘実験事実’があったと考え，それを出発点に据えて量子力学を建設してゆくことにしよう．

——古典量子論が成功を収めたといっても，それは1電子原子系にかぎられており，多電子問題では失敗した．また，衝突などの非周期問題を取り扱う方法もなかった．原理的にも，Bohr の仮説は古典量子論が出発点において借用した古典物理学と矛盾するものだったのである．このように，古典量子論そのものはかなり不完全な理論であったという事実を銘記しておく必要がある．新しい力学——量子力学はこの不完全さまでも継承するものであってはならない．

さて，de Broglie 仮説をめぐる第1章の議論を整理すれば，私達が量子力学建設の基礎とおくべき‘実験事実’は次のようにまとめられる：

“電子などの物質粒子および光は粒子と波動の二重性をもつ．ただし，粒子像における運動量 p およびエネルギー E と波動像における波数 k および角振動数 ω とは転換公式

$$k=\frac{1}{\hbar}p, \qquad \omega=\frac{1}{\hbar}E \tag{2.1.1}$$

によって結びつけられる．”

ここで，$\hbar=h/2\pi$ であるが，h と同じく $\hbar$ も Planck の定数とよばれる．すなわち，Planck の定数 $\hbar$ は，量子力学建設の出発点である‘実験事実’の中に，粒子像における力学変数と波動像における状態変数の関係を与える転換公式(*2. 1. 1*)の普遍的な換算定数として，はじめから組み込まれたことになる．Planck 定数の数値は

$$\hbar=6.582173\times10^{-22}(\mathrm{MeV\cdot s})=1.0545887\times10^{-27}(\mathrm{erg\cdot s})$$

であり，巨視的尺度から見ればもちろん極めて小さい．

波長を λ，振動数を ν と書けば，波数 k と角振動数 ω の定義式は

$$k=\frac{2\pi}{\lambda}, \qquad \omega=2\pi\nu$$

であるから，転換公式(*2. 1. 1*)は光の場合 ($p=h\nu/c$, $E=h\nu$) と物質粒子の場合 ($\lambda=h/p$, $\nu=E/h$) を統合した式になっている．光の場合は(*2. 1. 1*)において $\omega=$

ck という関係式を使えばよい．この関係式は波動が光速 c で伝わることを意味しているが，転換公式によって粒子像に翻訳すれば，光子が質量ゼロの相対論的粒子であることを意味する式 $E=cp$ に変身する．一般に E と p (同じことであるが ω と k) との関係は粒子の種類や運動状態によって決まるものである．たとえば，質量 m の非相対論的自由粒子の場合は $E=p^2/2m$ であるし，相対論的自由粒子の場合は $E^2=p^2c^2+m^2c^4$ となる．外力が加えられたり，他の粒子と相互作用しているときは，このように簡単な関係は成立しない．なお，

$$\lambda=\frac{h}{p} \tag{2.1.2}$$

を **de Broglie 波長** (de Broglie wavelength) という．質量 m の非相対論的自由粒子の場合は $\lambda=h/\sqrt{2mE}$ であるが，エネルギー E を eV (電子ボルト) の単位で書けば

電子　　$\lambda\cong 1.23\times10^{-7}/\sqrt{E}$　(cm)

陽子または中性子　　$\lambda\cong 2.86\times10^{-9}/\sqrt{E}$　(cm)

となる．1 keV＝1,000 eV 程度の電子および 10^{-1}eV 程度の熱中性子は 10^{-8}cm 程度の波長をもつわけであるが，これは原子の大きさまたは固体結晶の格子間隔程度の長さである．

さて，波長が確定した波という概念は厳密には平面波にしか当てはまらない．もっとも，球面波などのように単純な幾何学的構造をもつ波の場合には，限られた意味で波長を定義することができる．しかし，通常波長について語るときは，波が十分大きな空間領域にひろがっていて多数の波数を含む部分領域が存在し，その部分領域内において波が近似的に平面波と見なしうる場合が多い．平面波は一定の方向に伝搬する．したがって，上記の‘実験事実’において波数 k(または波長 $\lambda=2\pi/k$) 一定の波と運動量 p 一定の粒子を対応させるとき，波動像における平面波の伝搬方向と粒子像における運動方向とを一致させるべきであろう．すなわち，この‘実験事実’は，ひとまず，平面波と運動量一定の自由粒子との対応として把握しておかなければならない．ゆえに，転換公式 (2.1.1) は波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ と運動量ベクトル $\boldsymbol{p}$ の間の関係式として

$$\boldsymbol{k}=\frac{1}{\hbar}\boldsymbol{p},\qquad \omega=\frac{1}{\hbar}E \tag{2.1.3}$$

のように書き直しておく必要がある．もちろん，完全な平面波は空間的にも時間的にも無限にひろがった波であり，その点，正確な意味で物理的現実を表すわけではない．平面波はあくまでも単純化された理想像であり，この点に留意しながら読み進んでほしい．

——この観点から de Broglie 仮説と量子条件(*1. 5. 9*)との関係について一言注意しておきたい．de Broglie 仮説を基にして量子条件を導出するさい，円周が波長の整数倍に等しいという定在波条件を設定したが，このような議論は円周が波長に比べて十分長い場合にのみ——つまり量子数が十分大きい場合にのみ近似的に成立するだけのものである．円周と波長が同程度のとき——つまり量子数が小さいときは，全く無理な議論となることは自明であろう．de Broglie 仮説を量子条件(*1. 5. 9*)よりも基本的な仮説とする立場をとれば——いま私達はそれに近い立場をとったわけであるが——量子条件(*1. 5. 9*)は量子数が大きい場合にのみ成立する近似的な量子化規則にすぎないのである．Bohr の対応原理にしたがえば，量子数が大きくなれば量子効果が漸減し量子論は古典論に接近する．この意味で量子条件(*1. 5. 9*)は新しい力学，すなわち，量子力学の古典近似になっているはずである†.

これで一応量子力学建設の基礎におくべき‘実験事実’が決定したわけであるが，粒子と波動の二重性といっても実は何のことかわからない．(*2. 1. 3*)において，私達は，運動量 $\boldsymbol{p}$ およびエネルギー E をもつ粒子は波数 $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{p}/\hbar$ および角振動数 $\omega=E/\hbar$ をもつ波動であるという‘事実’を，または逆に，波数 $\boldsymbol{k}$ および角振動数 ω をもつ波動は運動量 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ およびエネルギー $E=\hbar\omega$ をもつ粒子であるという‘事実’を読むわけである．前者には de Broglie 仮説または電子波実験，後者には光の粒子性の発見という歴史的背景があるが，それを指摘するだけでは，やはり‘実験事実’としての粒子と波動の二重性を把握したことにはならない．粒子といい波動といっても，この場合，その実体は必ずしも明らかでない．元来，粒子という言葉には，小さな球のような‘物’を想像させる古典的粒子像がつきまとっている．一方，波動という言葉からは，水面の波のような‘現象’を主な内容とする古典的波動像が浮び上がってくる．このような古典的な粒子像と波動像を同時に

† 一般にはこの通りであるが，(*1. 5. 9*)を水素原子に適用して得たエネルギー準位の式(*1. 6. 12*)は量子力学が与える正確な式と完全に一致する．これは Coulomb 場の特殊性である．

ひとつの対象に付与することは明らかに無理であろう．粒子と波動の二重性は，古典的描像に執着するかぎり，到底理解しえないものである．とすれば，量子力学でいう粒子と波動の正体はどのようなものであろうか？

第1章で学んだところによれば，‘粒子’とはエネルギーおよび運動量をはこぶことのできる分割不可能な‘あるもの’であった．一方，‘波動’の本質的特徴は干渉現象を起こすところにある．‘粒子’とか‘波動’とかいっても，よく検討すれば，これ以上の性質——たとえば古典的描像から予想される諸性質を必要としているわけではない．この事実はしっかり覚えておこう．したがって，電子などの物質粒子や光が粒子と波動の二重性をもつという‘実験事実’は，電子や光子などの量子力学的‘粒子’がエネルギーと運動量をはこぶ分割不可能な，しかも，干渉現象を起こすことのできる‘あるもの’であることを主張しているのである†．繰り返しになるが，量子力学的‘粒子’は分割不可能という意味での粒子性と干渉現象を起こす能力としての波動性を兼ね備えたものである．このような‘実験事実’の具体的内容を理想的な干渉の実験を通して提示しよう．

干渉の実験　図2.1のような理想化した装置によって干渉の実験を行ってみる．図の下方には‘粒子’の射出器があり，中ほどに2個の小孔a, bをもつ衝立Sがおかれ，上方には螢光面または感光膜などの検出器を備えた壁面Dがある．射出器は運動量一定の‘粒子’すなわち平面波を上方に向って打ち出す††．衝立S上の小孔a, bの大きさはこの平面波の波長に比べて十分小さく，またa, b間の距離は波長と同程度であるように設計されているものとしよう†††．これらはいずれも

† 量子力学的‘粒子’はエネルギーや運動量ばかりでなく，‘粒子’の種類や状態に応じて，角運動量や電荷など各種の物理量をはこぶことができる．また，分割不可能という言葉は古典的連続体のような自由分割ができないという意味で使用した．量子力学的‘粒子’でも構造をもつ場合があり，そのときは‘粒子’を構成要素に分けて考えなければならない．分割不可能という用語でこのような場合を排除するつもりはない．しかし，いずれも量子力学建設後の次の段階で議論すべき事柄であろう．

†† 射出器の開口部はかなり大きいとしても有限であり，いうまでもなく，無限にひろがった理想的な平面波を射出できるわけではない．しかし，波のひろがりが波長および小孔a, bの大きさや間隔に比べて極めて大きい場合には，ほとんど平面波と見なすことができる．射出器を出る波を平面波といったのは，このような場合を想定しているからである．

††† 数値例で見たように，微視的粒子のde Broglie波長は微視的な長さである場合が多い．したがって，このような設計の小孔をもった衝立を実際に用意することは大そうむずかしい．しかし，この難点は，小孔をもった衝立のかわりに，Davisson-Germerおよび西川-菊池の電子波回折実験のさいに用いられたような結晶格子を導入することによって，解決されよう．その場合，格子間隔が入射粒子のde Broglie波長と同程度だったのである．図2.1の理想実験における小孔a, bをもった衝立Sは結晶格子の理想化または象徴化と考えておけばよろしい．議論の本質は変わらない．

微視的な長さであるが，射出器の開口部の大きさ，射出器と衝立Sの間および衝立Sと壁面Dの間の距離は巨視的な長さであり，微視的尺度で見れば極めて大きい．下方から上方へ向う平面波は小孔a, bを通して衝立Sの上方に漏洩するが，これは小孔a, bを射出源とする2個の球面波となって壁面Dの方へひろがってゆくであろう．SD間の距離が波長に比して極めて大きいため，この球面波は壁面D近くの巨視的小領域においては平面波で近似することができる．この2個の平面波は確定した相互位相関係をもっており，壁面D上では鮮やかな干渉縞が観測される．図2.1におけるP_{ab}はその干渉縞の強弱または明暗を高低で表した分布関数である．小孔a, b間の距離と波長が同程度であり，また，SD間の

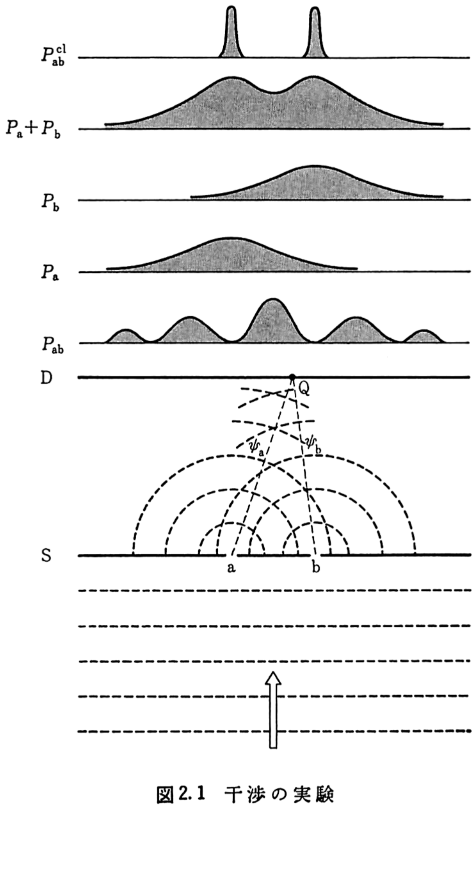


図2.1 干渉の実験

距離が十分大きければ，P_{ab} における山の幅すなわち干渉縞の大きさは巨視的な程度のひろがりをもつことになろう．これは重要な事実として記憶に留めておきたい．

さて，もしも小孔のどちらか一方——たとえば b (または a) を閉じたとすれば，この干渉縞は消え P_a (または P_b) という分布が現れる．この場合，$P_{ab} \neq P_a + P_b$ というところに干渉現象の本質がある．このような干渉現象は，もちろん，古典的な波動の場合にも存在した．通常，干渉現象は次のような機構を通して理解されている：(i) 波動の状態を記述する波動関数については‘重ね合せの原理’が成立する．すなわち，b (または a) を閉じたときの衝立 S の上方の波動関数を ψ_a (または ψ_b) とすれば，a, b 両方を開いたときの波動関数は $\psi_{ab} = \psi_a + \psi_b$ となる．(ii) 分布関数は波動関数の絶対値の 2 乗に比例する†．したがって，

$$P_a \propto |\psi_a|^2, \qquad P_b \propto |\psi_b|^2,$$
$$P_{ab} \propto |\psi_a + \psi_b|^2 = |\psi_a|^2 + |\psi_b|^2 + 2\,\mathrm{Re}(\psi_a{}^* \psi_b)$$

となり，干渉項 $2\,\mathrm{Re}(\psi_a{}^*\psi_b)$ の分だけ P_{ab} と $P_a + P_b$ とが食い違う，量子力学的‘粒子’の干渉現象もこの機構によって説明できることが実験的に確認されているわけである．その実験は同時に (*2.1.1*) の成立を確かめる手段でもあった．

干渉現象は正に量子力学的‘粒子’の波動性の発現であるが，ここまでの話に関するかぎりでは，量子力学的‘粒子’の起こす干渉現象と古典的波動の干渉現象との間には本質的な相違がないように見える．本質的な相違は量子力学的‘粒子’の粒子性の発現によって明らかになるはずであるが，現象面における相違は入射‘粒子’ビームの強度を極端に弱くしていった場合に現れる．通常，干渉実験は入射ビームの強度がある程度強い場合に行われるものである．量子力学的‘粒子’についていえば，P_{ab} はかなり多数個の‘粒子’を一度に撮影したとき画面に現れる干渉縞の分布関数である．古典的波動ならば，入射ビーム強度を弱くしていったとき，干渉縞はその形を保ちながらどこまでもその強さ (または明るさ) を減少さ

† 分布関数が波動関数の絶対値 2 乗そのものではなく，それに近い量——たとえばエネルギー流密度となる場合もある．光の場合はむしろエネルギー流密度を採用する方が自然であろう．D 上の分布関数を決める機構は‘粒子’と壁面上の検出器との相互作用である．しかし，検出機構の詳細が干渉現象についての議論を本質的に変えることはなく，波動関数の絶対値 2 乗をエネルギー流密度でおきかえても話は同じように進行する．とくに，この実験の場合，壁面 D 近くの巨視的小領域では ψ_a も ψ_b も平面波で近似してよいが，平面波に対してはエネルギー流密度は波動関数の絶対値 2 乗に比例しており，問題はない．

せてゆくであろう．量子力学的‘粒子’の場合はどうか？　入射ビームを極端に弱くして，毎秒1個ずつの‘粒子’が衝立Sに投入されるように工夫し，毎秒1枚ずつ壁面D上に現れる図形を撮影する場合を考えてみよう．すなわち，‘粒子’1個の起こす干渉現象を観測するわけである．この場合，干渉縞を表す分布関数P_{ab}が，高さを極端にへらしたとしても，そのままの形で現れるだろうか？　実験結果で答えれば‘否’である．撮影された画面では干渉縞は全く消え，ただ‘粒子’が到達した場所を示す小さなスポットが存在するだけとなる．これが量子力学的‘粒子’の粒子性を示す実験なのである．この実験結果は，逆に，‘粒子’が粒子性——分割不可能という性質——をもつとすれば，十分予想できるし，また理解することもできる．ここで干渉縞のひろがりが巨視的な大きさであった事実を想起しよう．もしも，1個の‘粒子’が画面に巨視的なひろがりをもつ干渉縞をつくったとすれば，1個の微視的‘粒子’が巨視的な範囲にひろがり，壁面D上の各点各点に分布した検出器に分割吸収されたことになる．これは分割不可能性に反する．ゆえに，干渉縞は消えなければならない．すなわち，ある程度強い強度の入射ビームの場合に現れた干渉縞は，ビーム強度を弱くしてゆけばどこかで崩れ出し，ついには‘粒子’の到達場所を示す小スポットだけを残して完全に消えるというわけである．

——微視的な粒子1個，たとえば，電子1個の写真を現実にとることは大変むずかしい．しかし，実験技術の進歩はこれにかなり近い状況の観測を可能にしている．

‘粒子’1個の画面に干渉縞が現れなかったという実験事実は，速断すれば，波動性が‘粒子’多数個の集団の属性であり‘粒子’1個のものではないことを示しているかのようである．しかし，これは真実ではない．‘粒子’1個を撮影した画面を多数集めて重ね焼きすれば，はじめの干渉縞P_{ab}が完全に再現される．この実験事実は波動性が‘粒子’1個の属性であることを主張している．‘粒子’1個の画面からは波動性の直接的証明である干渉縞が消えて粒子性しか読み取れないが，‘粒子’は決して波動性を喪失しておらず，重ね焼きによって干渉縞を復元できる潜在的能力を残しているのである．正にこの点において，量子力学的‘粒子’は古典的粒子と明らかに異なる．多数個の‘粒子’を含む強いビームによって得られた干渉縞の画面は，実は，この重ね焼きを1回の撮影によって実行した結果に他なら

ない†. 粒子と波動の二重性という‘実験結果’はここで述べたような具体的内容によって把握されるべきものである.

量子力学的‘粒子’が古典的粒子と違うという点をもう少し追求してみよう. ‘粒子’1個の干渉実験において, ‘粒子’は射出器を出て衝立Sの小孔a, bを通り壁面D上の1点Qに到達する. 古典的粒子ならば, この場合, 小孔a, bのどちらか一方を通ったということができる. aを通ったならばbを通らないし, bを通ればaを通ることはない. そして壁面Dの分布関数は図2.1の$P_{ab}{}^{cl}$ $(=P_a{}^{cl}+P_b{}^{cl})$となるはずである††. しかし, 量子力学的‘粒子’に対しては, ‘粒子’が小孔a, bのどちらか一方を通過したということはできない. もしも, 何らかの実験手段によってどちらか一方, たとえば, aを通ったことを確かめたとすれば, ‘粒子’の分割不可能性から, そのときは小孔bの出口のところにはもはや‘粒子’は存在しない. とすれば, この実験手段は小孔bを閉じることと同等であり, 衝立Sの上方にはaから出る球面波しか存在せず, 干渉が起こる原因は全く消滅する. したがって, この場合1個の‘粒子’がつくる画面を多数集めて重ね焼きしても決してP_{ab}は再現されず, ただP_aが現れるだけである. すなわち, 干渉縞が潜在的に存在するとき, または(強いビームについては)干渉縞が現実に生じたときには, ‘粒子’が小孔a, bのどちらを通過したのかという設問は全く意味を失う.

いままで, 量子力学的‘粒子’と古典的粒子との相違点ばかりを強調してきた. 量子力学的‘粒子’でも古典的粒子と同じような行動をする場合がある. 図2.1の装置の大きさと配置をそのままにしておいて, 入射‘粒子’の運動量pを大きくしてゆこう. これに応じて, 波長$\lambda=h/p$はどんどん短かくなり, ついには小孔a, bの差し渡しよりもずっと小さくなるだろう. 孔の大きさが波長に比べて十分大きいときは, 波の回折的なひろがりは問題にしないでもよいほど僅かになる. したがって, 小孔a, bから上方に漏洩する波はそのひろがりを減少させてゆき, ついには図2.2のように, ψ_aとψ_bが重ならないうちに壁面Dに到達する. この場

† しかしながら, この場合多数個の‘粒子’を含むビームは極端に密度の濃いものであってはならない. ‘粒子’間相互作用が無視できないほど密度が濃いビームによる撮影は‘粒子’1個の画面の重ね焼きとは違った結果を与える. しかし, 通常の実験で用いられているビームでは, そのような心配はいらない. 本講座第4巻『量子力学II』第12章参照.

†† $P_a{}^{cl}$(または$P_b{}^{cl}$)は小孔b(またはa)を閉じた場合に古典的粒子が壁面D上につくる分布関数である. なお, 量子力学的‘粒子’の波動性は$P_a{}^{cl}\neq P_a$, $P_b{}^{cl}\neq P_b$というところにも現れる. P_a, P_bはそれぞれ$P_a{}^{cl}, P_b{}^{cl}$よりもひろがっている.

合，壁面D上の分布 P_{ab} は P_{ab}^{cl} に極めて近くなり，孔が一方しかなかったときの分布 $P_a \cong P_a^{cl}$ と $P_b \cong P_b^{cl}$ の和に等しく，干渉現象は現れない．ゆえに，量子力学的'粒子'のもつ波動性は現象面に出てこない．なお，小孔a, bの大きさおよびa, b間距離が巨視的である場合は，微視的'粒子'の波全体のひろがりは図2.1や図2.2のように大きくはなく，通常，小孔a, bの差し渡しよりもずっと小さな'波束'となってしまう．このような'波束'が上記の装置で干渉現象を起こすはずはない．'粒子'はこの場合もっと直接的な意味で古典的行動をする．巨視的尺度では，'波束'全体が点状粒子のように見えるからである．

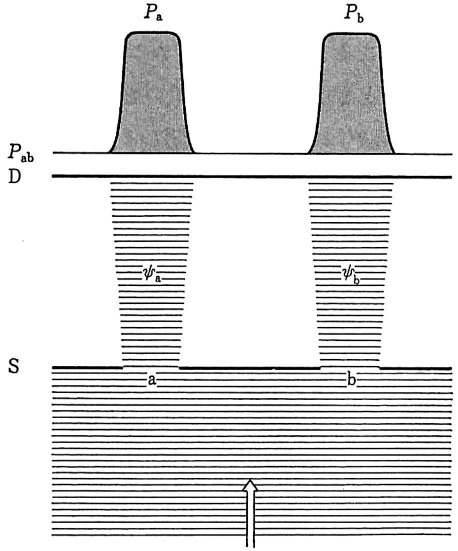


図2.2 古典的行動の1例

さて，運動量 p を大きくすることは波長 $\lambda = h/p$ を小さくすることであるが，同じ効果はPlanckの定数 h を小さくしても得られる．この事実は，Planck定数の効果が小さいと考えてよい場合，'粒子'が古典的行動をするということを意味している．したがって，これから建設しようという量子力学は，はじめから，Planckの定数 h をゼロに近づけた極限で古典力学に移行すべき運命を背負っているわけである．量子力学の成立は古典力学の完全否定または切り捨てを意味するものではない．古典力学を内包した上で，古典力学の適用可能領域外へ拡張的

に発展していったものが量子力学である．Bohr の対応原理はこの事実の部分的認識であった．物理学の発展はいつもこのような形で行われる．

§2.2　波動力学における運動法則

干渉の実験を通して見たように，量子力学的粒子の本質的特徴は，ひとまず，波動性にあるといってよい．波動性に力点をおいて粒子の行動を追求する学問が**波動力学**(wave mechanics)である．ここでは，前節で述べた実験事実を基にして波動力学における運動法則を設定しよう．当分の間，粒子1個の力学系を扱う．多粒子系の基礎法則は§3.5で説明するが，くわしくは第9章に委せる．

波動力学では，1個の量子力学的粒子の運動状態は時間 t と空間点 $\boldsymbol{r}=(x, y, z)$ の関数である**波動関数**(wave function)によって記述される．したがって，波動力学の運動法則は波動関数の時間的および空間的変化を規定するものでなければならない．この運動法則を古典力学の運動法則に対比させながら設定してゆくことにしよう．

a)　第1法則——自由粒子

古典力学の第1法則，すなわち，力の作用を受けない物体は等速直線運動を行うという法則に対応するものを第1法則と考えたい．等速直線運動は運動量一定の運動である．また，力の作用がないということで，エネルギーは運動量のみの関数として確定しており，エネルギー一定の運動でもある．前節の議論によれば，この運動状態にある力の作用を受けない粒子(すなわち，自由粒子)は平面波によって表されるはずである．したがって，波動力学における**第1法則**は当然次のような形で設定されるべきであろう：

“力の作用を受けない粒子が一定の運動量 $\boldsymbol{p}$ および一定のエネルギー E をもつとき，その運動状態は平面波

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}, t) = C \exp \frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et) \tag{2.2.1}$$

によって表される．”

ただし，C は振幅を表す定数(一般には複素数)である．

(2.2.1)では平面波を表すものとして複素数値をとる指数関数を用いたが，2, 3の注意が必要であろう．平面波というだけでは，実関数 $\sin[(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar]$ や

$\cos[(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar]$（またはその線形結合）を用いる可能性もある．複素数型の指数関数がよいか実数型の三角関数がよいかという問題は，実は，粒子の特性に応じて決めるべき事柄であって，いま直ちに答をいうわけにはゆかない．しかし指数関数(2.2.1)はその実部または虚部が上記の三角関数であるという意味で三角関数を含んでおり，指数関数の使用は三角関数の使用よりも一般的であるといってもよかろう．(2.2.1)における指数関数の使用は，ひとまず，その程度の事柄として受け入れてほしい．この問題については本節の後段でふたたび議論しよう．

――平面波(2.2.1)の位相速度（定位相面 $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et=$一定の移動速度）$v_{\mathrm{ph}}=E/p$ が古典的粒子速度に等しくない事実に注意せよ．第1章で説明したように，古典的粒子速度に相当するものは波束全体の移動速度，すなわち，群速度 $\boldsymbol{v}_{\mathrm{g}}=(\partial E/\partial \boldsymbol{p})$ である．くわしくは§2.3 b)参照．

b)　重ね合せの原理

古典力学の第2法則は，力 $\boldsymbol{f}$ の作用を受けている物体の運動量変化が $(d\boldsymbol{p}/dt)=\boldsymbol{f}$ にしたがうことを規定する法則である．量子力学的粒子でも，力が作用している場合には，当然運動量は一定に保たれず，その運動状態はもはや(2.2.1)のような平面波で表すことができなくなる．力が作用している場合の波動関数の時間・空間的変化を規定するものが波動力学における第2法則である．

早まって考えると，力が作用している場合でも波動関数がなお(2.2.1)の形をもっているとし，その中の運動量 $\boldsymbol{p}$ が古典的運動法則 $(d\boldsymbol{p}/dt)=\boldsymbol{f}$ によって変化するという方式で，波動力学の第2法則を規定したくなるかもしれない．この場合，運動量 $\boldsymbol{p}$ が時間空間変数の関数になるため，波動関数 $\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t)$ は(2.2.1)の形をしていたとしても平面波ではない．この波動に関しては，古典的軌道に波が随伴しているという描像が成立し，いかにも古典量子論と de Broglie 仮説の融合を成し遂げたかのように見える．だが，この方式は干渉の実験のところで述べた基本的な実験事実である‘重ね合せの原理’を取り入れていないので，正しい第2法則を与えない†．正しい第2法則への道は‘重ね合せの原理’の導入からはじまる．

量子力学における**重ね合せの原理**(principle of superposition)は，干渉の実

† もっとも，量子力学の古典近似としてこの方式によく似た形の波動関数が出現する場合がある．§3.6を見よ．

験から得られた‘重ね合せの原理’の帰納的発展として，次のように定式化することができる：

“いくつかの相異なる運動状態($a, b, c, \cdots$ と記号をつける)が可能な場合の波動関数 $\psi_{abc\cdots}$ は各々の運動状態の波動関数 $\psi_a, \psi_b, \psi_c, \cdots$ の和で表される．すなわち，

$$\psi_{abc\cdots} = \psi_a + \psi_b + \psi_c + \cdots \tag{2.2.2}$$

である.”

したがって，力が作用して運動量が一定に保たれなくなった場合は，まず，この‘重ね合せの原理’を適用しなければならない．

話を簡単にするため，運動量の値が $\boldsymbol{p}_{\mathrm{a}}$ と $\boldsymbol{p}_{\mathrm{b}}$ の2個しか許されないような特殊な力学系を考えてみよう．$\boldsymbol{p}_{\mathrm{a}}$ および $\boldsymbol{p}_{\mathrm{b}}$ をもつ運動状態は，それぞれ，

$$\psi_a(\boldsymbol{r}, t) = C_a \exp \frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}_a \cdot \boldsymbol{r} - E_a t),$$

$$\psi_b(\boldsymbol{r}, t) = C_b \exp \frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}_b \cdot \boldsymbol{r} - E_b t)$$

という波動関数で記述される．自由粒子の場合，粒子は一定の運動量をもつことが可能であり，その値 $\boldsymbol{p}_a$ または $\boldsymbol{p}_b$ に応じて運動状態は ψ_a または ψ_b によって表される．力が作用すれば運動量の値は確定しなくなり，$\boldsymbol{p}_a$ をとる運動状態と $\boldsymbol{p}_b$ をとる運動状態の両方が実現する．‘重ね合せの原理’によれば，このような場合の波動関数 ψ_{ab} は ψ_a と ψ_b の和でなければならない．すなわち，

$$\psi_{ab}(\boldsymbol{r}, t) = C_a(t) \exp \frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}_a \cdot \boldsymbol{r} - E_a t) + C_b(t) \exp \frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}_b \cdot \boldsymbol{r} - E_b t). \tag{2.2.3}$$

自由粒子の場合と違って，(2.2.3)における係数 C_a, C_b は時間 t の関数になるはずである．たとえば，$t=0$ までは粒子が運動量 $\boldsymbol{p}_a$ をもつ自由粒子状態にあったとしよう．$t=0$ では明らかに $C_a \neq 0$，$C_b=0$ である．$t=0$ から力が作用したとすれば，運動量の値が変わる可能性が生じ，それ以後は $C_b=0$ ということはありえない．当然 C_b はゼロでない値をもちはじめ，C_a もそれに応じて変化するだろう．このように，力が作用したときの動力学的変化は係数 C_a, C_b の時間的変動に反映している．この考え方に沿って動力学的変化を記述する方式が，‘重ね合せの原

理' を土台とした波動力学の第2法則の姿なのである．もちろん，第2法則は係数 C_a, C_b の時間的変動を与えてくれる法則でなければならないが，この問題の解答はもう少し後に延ばそう．その前にまだ仕事が残っている．

(2.2.3) における指数関数は第1法則にもとづいて導入されたわけであるから，運動量とエネルギーの関係は自由粒子のものであった．したがって，力の作用を受けている場合でも，そのままでよいかという疑問が起こる．しかし，エネルギー E_a, E_b はそれぞれ $\exp(-iE_at/\hbar)$ および $\exp(-iE_bt/\hbar)$ という時間依存性因子の中だけに収っているので，やはり時間依存性をもつ係数 C_a, C_b と一緒にすれば，すべてが時間依存性をもつ係数の中にまとめられてしまう．すなわち，

$$\psi_{ab}(\boldsymbol{r}, t) = B_a(t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_a\cdot\boldsymbol{r}\right)+B_b(t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_b\cdot\boldsymbol{r}\right) \qquad (2.2.4)$$

と書けば，エネルギーを決める問題も係数 B_a, B_b を求める動力学的な問題の中に統合されることがわかる．

(2.2.4) は運動量が2個の値しか取れないという特殊な力学系の波動関数であった．一般の力学系では運動量は無数に多くの値をとることができる．(2.2.4) に到る道筋をその場合にあてはめれば，波動関数は

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \sum_{\boldsymbol{p}'} B_{\boldsymbol{p}'}(t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}\right) \qquad (2.2.5)$$

でなければならない．和記号はあらゆる可能な運動量の値について加えることを意味する．運動量の値が連続的な分布をしている場合には，(2.2.5) よりも積分表示

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int A(\boldsymbol{p}', t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}\right)d^3\boldsymbol{p}' \qquad (2.2.6)^\dagger$$

の方がふさわしい．数学的には，これは Fourier 変換または Fourier 分解を表す式である．係数 $(2\pi\hbar)^{-3/2}$ は Fourier 変換 (2.2.6) と逆変換

$$A(\boldsymbol{p}', t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int \psi(\boldsymbol{r}, t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}\right)d^3\boldsymbol{r} \qquad (2.2.7)^\dagger$$

---

† (2.2.6) は

$$\psi(x, y, z, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}A(p_x', p_y', p_z', t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_x'x+p_y'y+p_z'z)\right]dp_x'dp_y'dp_z'$$

の簡略化である．(2.2.7) についても同様．なお，$d^3\boldsymbol{p}'=dp_x'dp_y'dp_z'$ および $d^3\boldsymbol{r}=dxdydz$ はそれぞれ運動量空間および座標空間の微少体積要素の略記である．いうまでもないが，$d^3\boldsymbol{p}'$ も $d^3\boldsymbol{r}$ もベクトルではなくスカラーであることに注意してほしい．今後はいつもこの種の略記法を用いる．

を対称的に書くという形式美のために導入されたものである．さて，Fourier 変換の技法を $A(\boldsymbol{p}',t)$ の t 依存性にまで適用すれば

$$A(\boldsymbol{p}',t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{A}(\boldsymbol{p}',E')\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E't\right)dE' \qquad (2.2.8)$$

であるから，(2.2.6) は

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^4}}\int\int\tilde{A}(\boldsymbol{p}',E')\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}-E't)\right]d^3\boldsymbol{p}'dE' \qquad (2.2.9)$$

と書くことができる．$\tilde{A}(\boldsymbol{p}',E')$ は $A(\boldsymbol{p}',t)$ の時間変数に関する Fourier 変換である．E' は単なる積分変数であり，直ちにエネルギーとして取り扱うわけにはゆかない．しかし，(2.2.9) を見ればわかるように，エネルギーという説明を与えてもおかしくない位置に座っている．E' にエネルギーという説明を与えるためには，E' と $\boldsymbol{p}'$ の関係を規定する必要がある．これが次の仕事であり，直接第2法則の設定につながる．

c) 第2法則——動力学的法則

‘重ね合せの原理’ を土台とした動力学的変化の表現形式を追求して (2.2.6) または (2.2.9) に到達したのであった．次はいよいよ第2法則の本体を構成する仕事にとりかかろう．具体的作業としては (2.2.9) の中に E' と $\boldsymbol{p}'$ の関係を持ち込めばよい．当分の間，質量 m をもつ非相対論的粒子だけを取り扱う．はじめ，力の作用を受けていない自由粒子を考える．力の作用を規定すべき第2法則の構成を自由粒子問題からはじめるというのは奇妙に見えるかもしれないが，第2法則の与える波動関数が力ゼロの極限で自由粒子の行動を規定した第1法則に矛盾しないことを確かめる必要もあり，重要な作業である．しかも，この作業が第2法則の一般形を予見させてくれる．さて，電子波の回折・干渉や光の Compton 散乱などの実験によれば，量子力学的自由粒子のエネルギー・運動量関係式は古典的粒子の場合と全く同じである．したがって，いまの場合は $E'=\boldsymbol{p}'^2/2m$ という関係を (2.2.9) に盛り込む必要がある．この仕事は $\tilde{A}(\boldsymbol{p}',E')$ に対する条件式

$$\left(E'-\frac{\boldsymbol{p}'^2}{2m}\right)\tilde{A}(\boldsymbol{p}',E')=0 \qquad (2.2.10)$$

として実現することができる．したがって，方程式

$$\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^4}}\int\int\left(E'-\frac{\boldsymbol{p}'^2}{2m}\right)\tilde{A}(\boldsymbol{p}',E')\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}-E't)\right]d^3\boldsymbol{p}'dE'=0 \qquad (2.2.11)$$

が成立するが，

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}-E't)\right] &= E'\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}-E't)\right] \\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}-E't)\right] &= \boldsymbol{p}'\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}-E't)\right] \end{aligned}\right\} \tag{2.2.12}$$

を用いれば†，(2.2.11) における $(E'-\boldsymbol{p}'^2/2m)$ という因子はつねに $[i\hbar(\partial/\partial t)+(\hbar^2/2m)\nabla^2]$ という微分演算子でおきかえられる．ただし $\nabla^2=(\partial^2/\partial x^2)+(\partial^2/\partial y^2)+(\partial^2/\partial z^2)$．上記の演算子は積分変数に無関係であり，積分の外へ取り出せる．残りの積分はちょうど (2.2.9) の右辺，すなわち，波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ そのものに他ならない．こうして，波動関数に対する方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{2.2.13}$$

が得られた．これが非相対論的自由粒子の行動を規定する波動力学の運動方程式である．

――ここに到って，第1法則において複素数型の指数関数をえらんだ効用がはっきりと現れる．(2.2.13) への道筋の上で $E'=\boldsymbol{p}'^2/2m$ に対応できるのは (2.2.1) のような指数関数だけであり，三角関数では不可能である．しかし，これはあくまでも $E'=\boldsymbol{p}'^2/2m$ という関係の特殊性である．相対論的自由粒子の場合には $E'^2=c^2\boldsymbol{p}'^2+m^2c^4$ (c は光の速度) となるが，これには実数型の三角関数でも対応できる．本節 f) を見よ．

まず，(2.2.13) が第1法則に矛盾しないことを確かめよう．$E=\boldsymbol{p}^2/2m$ であれば，(2.2.1) が (2.2.13) を満足することは自明である．逆に，(2.2.13) を解いて (2.2.1) を導くこともできる．実行してみよう．条件式 (2.2.10) は

$$\tilde{A}(\boldsymbol{p}',E') = \sqrt{2\pi\hbar}\,\delta\left(E'-\frac{\boldsymbol{p}'^2}{2m}\right)a(\boldsymbol{p}') \tag{2.2.14}$$

であれば成立する．$a(\boldsymbol{p}')$ は一応任意関数でよいが，具体形は後で決める．また，$\delta(\cdots)$ は Dirac の δ 関数である．($x\delta(x)=0$ により (2.2.10) が成立する．) (2.2.14) を (2.2.9) に代入すれば

---

† 記号 $(\partial/\partial\boldsymbol{r})$ は $(\partial/\partial x)$, $(\partial/\partial y)$, $(\partial/\partial z)$ をそれぞれ x 成分，y 成分，z 成分とするベクトル微分演算子を意味する．ベクトル解析でよく用いられている ∇(ナブラ) に他ならない．今後も便宜上この記法を用いるが，ときには，慣用記号 ∇ を使うこともある．なお，記号 $(\partial/\partial\boldsymbol{p})$ は運動量成分 p_x, p_y, p_z による偏微分を各成分とするベクトル微分演算子として使用する．

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int a(\boldsymbol{p}')\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}-\frac{\boldsymbol{p}'^2}{2m}t\right)\right]d^3\boldsymbol{p}' \qquad (2.2.15)$$

となる．これは(*2.2.13*)の一般解であり，(*2.2.3*)に相当する式であるが，力が作用していないので，係数 $a(\boldsymbol{p}')$ は時間の関数ではない．したがって，時刻 $t=0$ で運動量が $\boldsymbol{p}$ であったとすれば，その後いかなる時刻においても運動量は同じ値 $\boldsymbol{p}$ をとりつづけ，波動関数は(*2.2.1*)が与える平面波のままでいるはずである．これは

$$a(\boldsymbol{p}')=\sqrt{(2\pi\hbar)^3}\,\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})C \qquad (2.2.16)$$

として数学的に表現される．ただし，$\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})$ は，3次元 δ 関数 $\delta(p_x'-p_x)\delta(p_y'-p_y)\delta(p_z'-p_z)$ を意味する．(*2.2.16*)を(*2.2.15*)に代入すれば，直ちに(*2.2.1*)が得られる．

さて，自由粒子の運動方程式(*2.2.13*)において，右辺の演算子は $\hat{H}_0=\hat{\boldsymbol{p}}^2/2m$ と書くことができる．ただし，

$$\hat{\boldsymbol{p}}=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}} \qquad (2.2.17)$$

とおいた．文字の上につけた記号 ˆ は演算子を表すものとする．平面波に対する演算効果(*2.2.12*)を背景として，$\hat{\boldsymbol{p}}$ を運動量に相当する演算子と見なせば，$\hat{H}_0$ は丁度自由粒子のハミルトニアンに対応する演算子になっている．この形を踏み台にして，力が作用している場合の法則へ飛躍しよう．

力といってもいろいろあるが，もっとも簡単であり，しかもよく出てくる力は保存力であろう．保存力は粒子の位置だけの実関数であるポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ の負の勾配として表されるが，このとき，古典的ハミルトニアンは

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r}) \qquad (2.2.18)$$

である．したがって，保存力の作用下にある量子力学的粒子の運動状態を記述する波動関数 ψ は運動方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi:\qquad \hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+V(\boldsymbol{r}) \qquad (2.2.19)$$

を満足すると規定するのが自然であろう．偏微分方程式としてはっきり書けば，この運動方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t) + V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r},t) \qquad (2.2.20)$$

である．$V=0$ とおけば，これはたしかに自由粒子の方程式(*2.2.13*)にもどる．私達は(*2.2.20*)を波動力学における基礎的な運動方程式として設定しようというのである．(*2.2.20*)および(*2.2.13*)を**Schrödinger の波動方程式**または単に**Schrödinger 方程式**という．通常，$\hat{H}$ および $\hat{H}_0$ を**ハミルトニアン**(Hamiltonian)とよぶ．古典力学におけるハミルトニアンは時間発展の生成演算子という重要な役割を演じていたが，この役割はそのまま波動力学(すなわち，量子力学)に引き継がれ，ハミルトニアンはSchrödinger 方程式を通して波動関数の時間発展を生み出すのである．

――ハミルトニアンは粒子の種類，特性，力の性質などに適合するように構成されるのであるが，粗型はやはり古典的ハミルトニアンにある．古典的ハミルトニアン中の運動量を演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}=(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r})$ でおきかえれば，量子力学的ハミルトニアンが得られるのであるが，そのさい各種の注意が必要になる．一般的な構成法については第3章でまとめて説明する．

いまや，私達は波動力学の**第2法則**を次のような規定として述べることができる：

“力が作用している粒子の運動は，運動量一定の状態を表す平面波を重ね合せた波動となり，その時間空間的変動はSchrödinger 方程式にしたがう．”

第2法則設定の道筋において，(*2.2.13*)から(*2.2.19*)または(*2.2.20*)への飛躍は極めて自然のように見える．しかし，これはあくまでも帰納的推論であって，演繹論理的な必然性をもって導き出したわけではない．Schrödinger 方程式の真偽または当否は，これ以後構成してゆく波動力学または量子力学の体系から引き出される理論的結論全体を各種の実験と照合して，判断すべき性質のものである．Schrödinger 方程式は実際かなり広範囲の現象による検証に耐えて，その正しさを示しつづけてきた．

d）第3法則――波動関数の確率解釈

古典力学には第3法則があった．これは作用反作用の法則として知られているが，内容的には運動量保存則の中に統合されるべきものである．運動量保存則は力学系の並進不変性の帰結である．一般に，保存則は力学系の対称性もしくは変

換に対する不変性と結びついて現れる．この間の事情は量子力学でも全く同様であり，後でまとめて議論する予定である．とくに第8章を参照されたい．したがって，作用反作用の法則を事新しく第3法則として掲げることはやめよう．波動力学の出発点に据えるべき法則づくりという観点に立てば，第1法則と第2法則だけではまだ不十分である．なぜならば，粒子の運動状態を記述するという波動関数が何を表すものであるかという質問に答えていないからである．波動関数の物理的意味が不明のままでは，理論体系を実際の現象に結びつける手段もわからないし，偏微分方程式であるSchrödinger方程式を解くさいに必要な境界条件を設定することもできない．波動力学における第3法則は波動関数の物理的意味づけを規定すべきものであろう．

本論にはいる前に，Schrödinger方程式(*2.2.20*)を満足する波動関数 ψ の一般的性格をしらべておこう．

(i)　**複素数性**　ψ は本質的に複素数であり，実数部分と虚数部分を含む．なぜならば，もしも ψ が純実数(または純虚数)であれば，Schrödinger方程式の左辺が純虚数(または純実数)となるのに右辺は純実数(または純虚数)であり，等式が成立しないからである．経験によれば，観測と直接結びつく量は実数値をとるが，とすれば，波動関数 ψ そのものよりも ψ からつくられる実数量に直接物理的意味を与える方が自然であろう．現に，干渉の実験は干渉縞の強弱分布が波動関数の絶対値2乗に比例するという機構で説明したのであった．そこで，$|\psi|^2$ の性質をしらべてみよう．

(ii)　**連続の式**　波動関数 ψ から

$$\rho(\boldsymbol{r},t)=|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 \tag{2.2.21}$$

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\hbar}{2im}\left\{\psi^*(\boldsymbol{r},t)\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial\boldsymbol{r}}-\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\partial\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r},t)\right\} \tag{2.2.22}$$

という実数量をつくれば，連続の式

$$\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}+\mathrm{div}\,\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)=0 \tag{2.2.23}$$

が成立する(＊印は複素共役を示す)．この式は，(*2.2.20*)に $\psi^*(\boldsymbol{r},t)$ をかけたものから(*2.2.20*)の複素共役式に $\psi(\boldsymbol{r},t)$ をかけたものを辺々引き算し，V の実数性を考慮すれば，直ちに得られる．連続の式の意味は，$\rho(\boldsymbol{r},t)$ を密度関数とする

‘ある量’が保存されるということである．すなわち，(*2. 2. 23*)の両辺を閉曲面Sによって囲まれた領域Ωについて積分すれば——Gaussの定理により

$$\frac{d}{dt}\int_{\Omega}\rho(\boldsymbol{r},t)\,d^3\boldsymbol{r} = -\oint_{\mathrm{S}}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)\cdot d\boldsymbol{f} \qquad (2.2.24)$$

となるが，これはΩ内の‘ある量’の総和$\int_{\Omega}\rho d^3\boldsymbol{r}$が増加または減少する時間的割合が閉曲面S(ベクトル$d\boldsymbol{f}$はその微少面素)を通して流入または流出する‘ある量’の流れの総和$\oint_{\mathrm{S}}\boldsymbol{J}\cdot d\boldsymbol{f}$に等しいことを表している．いま，閉曲面Sを無限の彼方に退け領域Ωを全空間にひろげれば，無限遠方における波動関数——したがって流れ密度$\boldsymbol{J}$が消滅するという境界条件の下で(*2. 2. 24*)は‘ある量’の保存則

$$\int\rho(\boldsymbol{r},t)\,d^3\boldsymbol{r} = \text{一定} \qquad (2.2.25)$$

を与える†．こうして，私達の問題は‘ある量’とは何であるか，すなわち，$\rho=|\psi|^2$はどのような量の密度関数であるか，そして$\boldsymbol{J}$はどのような量の流れ密度であるかを明らかにする仕事となった．この仕事のため，もうひとつだけ波動関数の性質を述べておこう．

(iii) **拡散型時間発展** Schrödinger方程式，とくに自由粒子の方程式(*2. 2. 13*)による運動は狭い領域に集中していた波動を空間的に拡散させる効果をもつ．一般解(*2. 2. 15*)によれば，要素平面波の位相速度$v_{\mathrm{ph}}=E'/p'=p'/2m$が$p'$の関数となるため，各要素平面波は運動量ごとに異なる位相速度で進行し，波形の崩れが予想される．これは位相速度が波数または振動数の関数になっているような波動，すなわち，分散性波動の一般的特徴である(くわしくは§2. 3 b)を見よ)．とくに位相速度が波数に比例して増大する場合は，定性的にも予想されるように，波形はひろがる傾向をもつ．波がひろがる現象は，分散性に関する面倒な議論を経るまでもなく，前節の干渉現象においてすでに期待されていた波動特有の性質である．なぜならば，衝立S(図2. 1参照)の直ぐ上方では波動は小孔a, bの出口

† この境界条件には補足説明が必要であろう．たとえば，(*2. 2. 1*)のような平面波や散乱問題のさいに登場する定常状態波動関数は無限遠方でも値をもち消滅することはない．しかし，その場合はρ自身が時間的に一定となり保存則は成立する．そして，(*2. 2. 24*)の右辺もたしかにゼロとなる．保存則を与える境界条件は，厳密には，ψまたは$\boldsymbol{J}$自身が境界面上で消滅することではなく，総和$\oint_{\mathrm{S}}\boldsymbol{J}\cdot d\boldsymbol{f}$が消えることなのである．だが，繰り返し説明してきたように，平面波のように無限にひろがる波動関数は数学的理想化の極致と考えるべきものであり，物理的に見ればどんな大きなひろがりでも結局は有限である．ゆえに，無限遠方においてψ自身が消滅するという境界条件は常に成立すると考えてよい．

付近にしかないが，進行とともにひろがり，ついには壁面 D 上の巨視的分布にまで成長するからである．このひろがりがなければ，そもそも，干渉現象は観測できない．

以上の 3 性質を踏み台にして波動関数の物理的意味を探ってゆこう．連続の式は電磁気学や流体力学にも現れ，電荷保存や質量保存を表現するものであった．したがって，$\rho=|\psi|^2$ を量子力学的粒子の電荷分布または質量分布を表す量と解釈したくなるかもしれない．しかし，この解釈は基礎においた実験事実に明らかに抵触する．もしも，そのような解釈が正しいとすれば，上記の性質(iii)により電子などの微視的粒子自身が巨視的範囲にひろがってしまうことになるが，このような電子は出現したこともないし，分割不可能性とも矛盾するというわけである．第 2 の可能性は $\rho=|\psi|^2$ が多数個の粒子集団の分布関数であると説明することかもしれない．古典的粒子の集団では粒子分布の粗密が波動現象となる場合が現に存在するし，その場合には，波動関数の拡散は粒子間隔の増大という形で説明されるので，一応自然な解釈のように見える．しかし，これも直ちに基礎においた実験事実との矛盾に直面する．干渉の実験のところで確認しておいたように，波動は決して粒子集団の現象ではなく，粒子 1 個の属性であったからである．

基礎においた実験事実と矛盾しない合理的な説明は M. Born によって与えられた．それは $\rho=|\psi|^2$ が粒子の存在確率密度に比例する量であると規定する方式である．この解釈によれば，波動関数の拡散は確率分布のひろがりを惹き起こすだけであり，決して粒子自身の拡大膨張を意味しない．すなわち，はじめ特定の狭い領域に粒子が存在することが確実であったとしても，時間の経過とともに，粒子がどこにいるかわからなくなるだけの話である．干渉の実験もこれで合理的に理解することができる．壁面 D 上の $\rho=|\psi|^2$ の分布は干渉縞の強弱高低と同形のはずであるが，山の部分は粒子の存在確率が谷の部分よりも大きいところである．したがって，前節の干渉実験の後段で述べたような粒子 1 個についての写真を多数つくれば，存在確率の大きい山の部分で粒子を捕えた写真の枚数は存在確率の小さい谷の部分で粒子を見つけたものの数よりも多いであろう．このような写真を多数揃えて重ね焼きをつくれば，$\rho=|\psi|^2$ の分布と全く同形の強弱分布をもった干渉縞が得られることは当然である．この重ね焼きの場合，または同じことであるが，強いビームによる干渉縞の写真における粒子分布は正に $\rho=|\psi|^2$

によって再現される．これが波動関数の確率解釈による干渉実験の説明であり，どこにも矛盾はない．

このようにして，粒子の位置についての情報は波動関数の絶対値2乗が存在確率密度を表すという規定によって得られることになった．しかし，運動量についての知識をどのようにして知るか，まだわかっていない．古典的な力学量はすべて位置座標と運動量の関数として表されていたから，波動力学でも運動量についての知識を与える方式を確立しておく必要がある．この問題の解答は，第1法則と第2法則および波動関数の確率解釈を求めてきたプロセスの中に見出すことができる．第1法則では運動量確定の状態を平面波と規定し，第2法則前段では運動量変化を平面波の重ね合せにおける係数(または振幅)の変動によって記述するものと規定した．したがって，波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ によって記述される運動状態においては，運動量に関する情報は(2.2.6)における Fourier 成分 $A(\boldsymbol{p}, t)$ を通して与えられるはずである．このさい，Fourier 変換(2.2.6)と逆変換(2.2.7)および Parseval の等式

$$\int |\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 d^3\boldsymbol{r} = \int |A(\boldsymbol{p}, t)|^2 d^3\boldsymbol{p} \qquad (2.2.26)$$

を想起しよう．この3者は数学的には ψ と A とが全く同格であることを主張している．ゆえに，$|\psi|^2$ に存在確率密度という意味を与えるならば，$|A|^2$ にも同様な説明——すなわち運動量についての確率分布という説明を与えるべきであろう．

以上の推論を踏み台にして，いまや，私達は次のように**第3法則**を規定することができる：

"時刻 t のとき，粒子が空間における点 $\boldsymbol{r}=(x, y, z)$ のまわりの体積 $d^3\boldsymbol{r}=dxdydz$ をもつ微小領域の中に位置して見出される事象の確率は $|\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 d^3\boldsymbol{r}$ に比例する"，および "時刻 t のとき，粒子が運動量空間における点 $\boldsymbol{p}=(p_x, p_y, p_z)$ のまわりの体積 $d^3\boldsymbol{p}=dp_x dp_y dp_z$ をもつ微小領域の中の運動量をもって見出される事象の確率は $|A(\boldsymbol{p}, t)|^2 d^3\boldsymbol{p}$ に比例する"．

ただし，この法則における ψ と A の関係は(2.2.6)，(2.2.7)および(2.2.26)によって与えられるものとする．

——第3法則について一言注意しておこう．波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ の物理的意味づけという作業が絶対値2乗 $|\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2$ に存在確率密度という説明を与えるだけ

で完了したと考えてはいけない．波動関数は複素数であるから2個の実関数に相当する自由度をもっており，絶対値2乗という実関数ただ1個に意味づけを与えるだけでは不十分である．残りの情報は絶対値2乗をつくるさい消えてしまう位相関数 $\arg\psi(\boldsymbol{r},t)$ の中にある．この事情は運動量一定の状態を表す平面波を見れば明白であろう．平面波では運動量に関する情報は位相関数の中だけにあるが，絶対値2乗をとれば完全に消えてしまう．一般に，$\psi(\boldsymbol{r},t)$ の位相関数に含まれている情報は Fourier 変換を通して $A(\boldsymbol{p},t)$ に移植されている．したがって，第3法則としては $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ と同時に $|A(\boldsymbol{p},t)|^2$ の物理的意味を規定しなければならない．

第3法則の立場に立って連続の式(2.2.23)と保存則(2.2.25)を見直そう．いうまでもなく，保存される'ある量'とは粒子の存在確率である．$\rho=|\psi|^2$ は存在確率密度となり，$\boldsymbol{J}$ は確率流密度となる．したがって，保存則または連続の式は，粒子が消滅したりまたは新しく生産されたりしないことを主張する法則である．これは，数学的には，ポテンシャル V の実数性，または同じことであるがハミルトニアン $\hat{H}$ の Hermite 性から導かれた性質であることを覚えておいてほしい†．運動量についての確率分布も保存則 $\int|A|^2d^3\boldsymbol{p}=$一定を満足するが，これは Parseval の等式(2.2.26)から直ちに得られる．

さて，第3法則によればある空間領域 Ω の中に粒子を見出すことの確率は

$$P(\Omega)=\int_{\Omega}|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3\boldsymbol{r}\left[\int|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3\boldsymbol{r}\right]^{-1} \qquad (2.2.27)$$

となる．分母の積分はもちろん全空間にわたって行われる．$P(\Omega)$ は，$P(0)=0$ から $P(\infty)=1$ までを領域 Ω の増大に応じて単調増加するなど，確率関数としての性質をすべてもっている．(2.2.27)の分母は保存則により定数であるが，こ

† Hermite 性とは次のような性質である：いま，2個の関数 $u(\boldsymbol{r}), v(\boldsymbol{r})$ の関数内積を $(u,v)=\int u^*vd^3\boldsymbol{r}$ と定義しよう．演算子 $\hat{O}$ に対して $(\hat{O}u,v)=(u,\hat{O}^\dagger v)$ を与える演算子 $\hat{O}^\dagger$ を $\hat{O}$ の **Hermite 共役演算子**とよぶ．$\hat{O}^\dagger=\hat{O}$ であれば $\hat{O}$ は **Hermite 演算子**という．(2.2.19)のハミルトニアンの場合

$$(\hat{H}u,v)-(u,\hat{H}v)=-\frac{\hbar^2}{2m}\oint_{\mathrm{S}}\left(\frac{\partial u^*}{\partial \boldsymbol{r}}v-u^*\frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{r}}\right)\cdot d\boldsymbol{f}$$

となるから(S は全領域を包む無限遠閉曲面)，$\hat{H}$ の Hermite 性は右辺をゼロにするような境界条件を満足する関数集団に対して成立する．(2.2.17)で定義された運動量演算子の Hermite 性は

$$(\hat{\boldsymbol{p}}u,v)-(u,\hat{\boldsymbol{p}}v)=i\hbar\oint_{\mathrm{S}}u^*vd\boldsymbol{f}$$

の右辺が消えるような境界条件の下で成立する．

れは波動関数の定数因子の中に繰り入れることができる．Schrödinger 方程式の線形同次性によれば，ψ が解ならば $c\psi$ (c は任意定数) も解であるから，c を適当に(すなわち，$|c|^{-2}=\int|\psi|^2d^3\boldsymbol{r}$ と) えらべば，新しい ψ (元の ψ の c 倍) はいつも

$$\int|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3\boldsymbol{r}=1 \tag{2.2.28}$$

を満足する．このとき，確率関数は

$$P(\Omega)=\int_\Omega|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3\boldsymbol{r} \tag{2.2.29}$$

である．このように定数因子をえらぶことを波動関数の**規格化**(normalization)といい，(*2.2.28*) を**規格化条件**(normalization condition)という．規格化条件 (*2.2.28*) は絶対値 2 乗が可積分であるような関数だけにしか適用できない．平面波のように全空間にひろがっている波の場合は (*2.2.28*) の左辺が発散し，この方式の規格化は不可能である．平面波の規格化については次節および散乱理論(『量子力学II』第 12 章)を参照していただきたい．なお，どのような方式でも，規格化条件は定数因子の絶対値を決めるだけであり，定数位相は不定のまま残される．不定の定数位相は問題に応じて適当にえらべばよい．また，ψ についての規格化は，Parseval の等式(*2.2.26*)を通して，自動的に A についての規格化を与えたことになる．

e) 位置座標の測定

さて，第 3 法則による波動関数の意味づけと実験による観測操作との関係を明らかにしておこう．観測装置の構造に応じて，空間の全領域を互いに重ならない n 個の領域 $\Omega_1, \Omega_2, \cdots, \Omega_n$ に分割する．いま，それぞれが同じ粒子 1 個だけからなる独立な力学系を N 個用意しよう．ただし，各力学系の運動状態は全く同じ波動関数 ψ によって記述されているものとする．また，N は十分大きくなければならない．この多数の力学系の各々において同時に粒子の位置座標の測定を行った結果，領域 Ω_i の中で粒子を見つけた力学系の数が N_i であったとしよう．もちろん，$\sum_{i=1}^{n}N_i=N$. N が十分大きい極限では $w_i=N_i/N$ は番号 i によって定まる一定の値に近づくはずである．この値はもちろん実験結果そのものであり，粒子を Ω_i 中で見出す確率に他ならない．第 3 法則はその値が波動力学の枠内で理論的に求められる $P(\Omega_i)=\int_{\Omega_i}|\psi|^2d^3\boldsymbol{r}$ に等しいことを主張している．図 2.3 には

領域 $\Omega_i (i=1, 2, \cdots, n)$ を1次元変数 x の区間で表現したときの $w_i=N_i/N$ がヒストグラムで描かれているが，N, n を十分大きく Ω_i を十分小さくとった極限ではそのヒストグラムは $|\psi(x, t)|^2$ と同じ滑らかな曲線に近づくはずである．これが第3法則の内容であるが，干渉の実験のとき粒子1個の写真を重ね焼きすれば干渉縞が得られるという事情の忠実な一般化になっている．

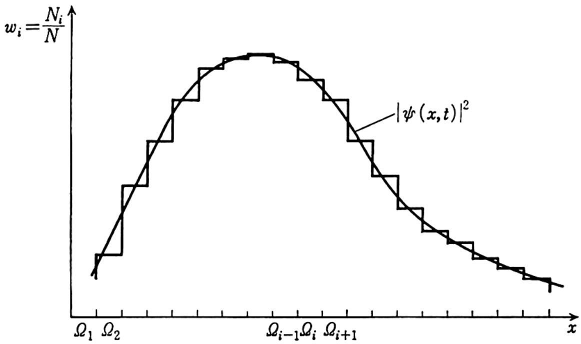


図 2.3 位置座標の測定

この測定結果から粒子位置の平均値を求めてみよう．Ω_i の中心点の x 座標を X_i とすれば，平均位置の x 座標は $\langle x \rangle = \sum_{i=1}^{n} X_i N_i/N = \sum_{i=1}^{n} X_i w_i$ である．n 大 Ω_i 小の極限では，和は積分となり，X_i は x で，w_i は $|\psi|^2$ でおきかえられる．ゆえに平均位置の x 座標として次式を得る：

$$\langle x \rangle = \int x |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r}. \tag{2.2.30}$$

y 座標や z 座標についても同様である．一般に，位置座標の関数である力学量 $F(\mathbf{r})$ の平均値は

$$\langle F \rangle = \int F(\mathbf{r}) |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} \tag{2.2.31}$$

となる．これを状態 ψ における力学量 F の**期待値**(expectation value)という．ただし，(2.2.30)および(2.2.31)では波動関数 ψ は規格化されているとした．

以上の説明は位置座標の測定に関するものであったが，運動量の観測操作についても全く同様な説明が可能である．自明の事柄と思うので，事新しく説明することはしない．なお，運動量 x 成分の期待値は

$$\langle p_x \rangle = \int p_x |A(\boldsymbol{p}, t)|^2 d^3\boldsymbol{p} \tag{2.2.32}$$

であり，運動量の関数である力学量 $G(\boldsymbol{p})$ の期待値は

$$\langle G \rangle = \int G(\boldsymbol{p}) |A(\boldsymbol{p}, t)|^2 d^3\boldsymbol{p} \tag{2.2.33}$$

となる．ψ と A とは(2.2.6), (2.2.7), (2.2.26)によって結びつけられているので，(2.2.30)および(2.2.32)からそれぞれ

$$\langle x \rangle = \int A^*(\boldsymbol{p}, t) i\hbar \frac{\partial A(\boldsymbol{p}, t)}{\partial p_x} d^3\boldsymbol{p} \tag{2.2.34}$$

$$\langle p_x \rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r}, t) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(\boldsymbol{r}, t)}{\partial x} d^3\boldsymbol{r} \tag{2.2.35}$$

という表式を出すことができる．計算は読者に委せよう．一般に位置と運動量の関数である力学量 $F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ の期待値は，$\boldsymbol{r}$ または $\boldsymbol{p}$ を $i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p})$ または $(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r})$ でおきかえた演算子 $F(\boldsymbol{r}, (\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r}))$ または $F(i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p}), \boldsymbol{p})$ を用いて

$$\langle F \rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r}, t) F\left(\boldsymbol{r}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right) \psi(\boldsymbol{r}, t) d^3\boldsymbol{r} \tag{2.2.36 a}$$

$$= \int A^*(\boldsymbol{p}, t) F\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p}\right) A(\boldsymbol{p}, t) d^3\boldsymbol{p} \tag{2.2.36 b}$$

のように表される．(2.2.34), (2.2.35), (2.2.36)など力学量と期待値についての詳細は第3章で説明する予定である．

ところで，第3法則による波動関数の意味づけは，観測操作が力学系の運動状態を一変させてしまうという驚くべき結果を招来する．いま，ψ で記述される状態において粒子位置を測定したところ，特定の領域 Ω_i の中で見出されたとしよう．測定直後の粒子の波動関数 ϕ_i は当然 Ω_i の中だけに分布し，その外ではゼロでなければならない†．一般に，ϕ_i は ψ とは全く異なる関数である．したがって，粒子の波動関数は測定操作により ψ から ϕ_i に急変する．この変化は，しばしば，観測による‘波の収縮’とよばれる．観測による‘波の収縮’は非因果的かつ確率現象的な変化であり，Schrödinger 方程式(2.2.20)によって追跡できる性質のものではない．観測操作による‘波の収縮’は位置測定ばかりでなく，運動量および

† 他領域 Ω_j $(i \neq j)$ 中に見出された場合，測定直後の波動関数 ϕ_j はもちろん Ω_j 中でしか値をもたない．ゆえに，ϕ_i と ϕ_j の積は到るところゼロとなり，明らかに関数内積 (ϕ_i, ϕ_j) もゼロとなる．$(\phi_i, \phi_j)=0$ のとき，ϕ_i と ϕ_j は‘直交する’という．

その他の力学量の測定にさいしても現れる．この変化は微視的な力学系である観測対象と巨視的力学系である測定装置との間の複雑な相互作用の結果生ずるものである．本来，観測過程はこの2つの力学系全体に量子力学(および量子統計力学)を適用して分析すべきものであろう．しかし，この問題の理論的解明はかなりむずかしい仕事であり，多くの試みにも拘わらず，現在でも万人を納得させるに足りる観測過程論が確立されているとはいえない†.

波動関数の確率解釈にもとづく正統的な量子力学の建設は主としてN. Bohrの指導の下にコペンハーゲンの研究所で行われたので，**コペンハーゲン解釈**(Copenhagen interpretation)とよぶことがある．コペンハーゲン解釈による量子力学は，かなり多くの微視的現象に対して正しい理論的予言を与えてきたし，少なくとも，明らかに実験と矛盾する結果を導いたという事実はない．この意味において，コペンハーゲン解釈は，たしかに実験によって支持されており，今のところ完全に正しいといってよい．しかしながら，物理学の基礎法則の中に確率概念をもち込んだという点で，コペンハーゲン解釈に深刻な疑問をもつ物理学者達がいる．その中に，量子現象の解明に重要な貢献をしたA. Einsteinがいたことは大そう興味深い．彼とN. Bohrとの激しい論争は歴史上有名であるが，この論争は量子力学の理論構造の理解を深めるためにも極めて有用であった．

——古典物理学でも確率概念がしばしば利用されているが，これは基礎法則のところではない．古典物理学の基礎法則はすべて決定論的である．確率概念は，私達が対象についてもっている知識の不正確さや不十分さを補う手段として，現象論的法則を求めるさいに導入されたものであった．したがって，量子力学もこのような半現象論的段階の理論体系であり，決して基礎法則ではないと考える立場がありうる．現在でも，この立場に立って量子力学を，より基礎的と見なしうる決定論的な‘力学’から，導き出そうと試みる物理学者がいる．

f) 波動関数，確率振幅，状態関数

これまで，波動の時間空間的変化を記述する関数というつもりで波動関数という呼名を用いてきた．これはかなり漠然とした呼称であり，常識的には，空間点$\boldsymbol{r}$と時間tの関数$\psi(\boldsymbol{r}, t)$に対して使用する．しかし，上記の第3法則の意味で

† 本講座第4巻『量子力学II』第19章§19.5を参照されたい．

絶対値2乗が確率に結びつく場合，それを強調して**確率振幅**(probability amplitude)ということがある．$\psi(\boldsymbol{r},t)$ は位置についての確率振幅であり，$A(\boldsymbol{p},t)$ は運動量についての確率振幅である．また，ある時刻における運動状態の完全な記述を与えるものという意味で**状態関数**(state function)という呼称を用いることがある．Schrödinger 方程式(*2.2.20*)を満足する非相対論的粒子の場合には，波動関数は確率振幅であり状態関数でもある．ところが，相対論的運動をする粒子の場合，波動関数は必ずしも確率振幅や状態関数にならないことがある．この問題について簡単に説明しておこう．

相対論的運動に対しても(*2.2.9*)までの推論はそのまま通用する．しかし，エネルギーと運動量との関係は $E'=\boldsymbol{p}'^2/2m$ ではなく，$E'^2-\boldsymbol{p}'^2c^2=m^2c^4$ (c は光の速度)でなければならない．この式を出発点として(*2.2.12*)を用いる同様な手続を施せば，**Klein-Gordon 方程式**

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}-\nabla^2\psi+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi=0 \tag{2.2.37}$$

が生まれる．この方程式の性格は Schrödinger の方程式とかなり違う．まず，方程式(*2.2.37*)自身が波動関数 ψ の複素数性を要求することはない．これは(*2.2.37*)が実数演算子のみを含むという事実を見れば明らかであろう．実関数も複素関数も解になることができる．波動関数が実数であるか複素数であるかは別の要件で決まる問題なのである．次に波動関数 ψ が確率振幅でありえないという事実を示そう．ψ が複素数である場合を考える．(*2.2.37*)に ψ^* をかけた式から(*2.2.37*)の複素共役式に ψ をかけた式を辺々引き算すると，(*2.2.23*)と全く同形の連続の式が得られる．ただし，Klein-Gordon 方程式の場合，

$$\rho(\boldsymbol{r},t)=-i\varepsilon\left\{\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)-\psi^*(\boldsymbol{r},t)\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}\right\} \tag{2.2.38 a}$$

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)=-i\varepsilon c^2\left\{\psi^*(\boldsymbol{r},t)\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial\boldsymbol{r}}-\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},t)}{\partial\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r},t)\right\} \tag{2.2.38 b}$$

である．ここで，$-i$ は ρ と $\boldsymbol{J}$ が実数になるように付加された因子であり，ε は今のところ実数であれば任意でよい．いずれにしても，連続の式が成立するので，ρ を密度関数とする‘ある量’が保存される．しかしながら，Schrödinger 方程式の場合と違って，ρ が正値定符号でなく正負いずれの値もとるため，粒子の存在

確率密度という意味づけが不可能になる．すなわち，Klein-Gordon 方程式の波動関数は確率振幅ではありえない．さらに，この方程式が時間について 2 階の微分方程式であることを考えれば，ある時刻における波動状態の完全記述は波動関数 ψ ばかりでなく 1 階導関数 $(\partial\psi/\partial t)$ の知識を必要とすることがわかるであろう．この意味で波動関数 ψ そのものを状態関数とよぶわけにはいかない．通常，この ψ は‘場の量’とよばれている．

——相対論的波動方程式としては Klein-Gordon 方程式の他に Dirac 方程式がある．これは時間についても空間についても 1 階の微分演算子しか含んでいないので，事情はかなり違う．くわしくは第 7 章を見よ．

さて，Klein-Gordon 方程式の場合について結論をいえば，ρ は粒子の電荷密度，$\boldsymbol{J}$ はその電流密度を表す力学量として説明する方式がもっとも自然である†．後でくわしく議論するように，量子力学では力学量は一般に演算子となる．したがって，場の量 ψ 自身を力学量，すなわち，演算子として取り扱う必要が生じ，必然的に場の量子論が登場する．場の量子論では，一般に，確率解釈の対象となる状態関数 Ψ は場の量 ψ とは別物である．Schrödinger 方程式 (2.2.19) の場合に状態関数 ψ が $\boldsymbol{r}$ の関数であったように，場の量子論の状態関数 Ψ は場の量 ψ の汎関数として表すことができる．また，状態関数としての基本的性格は，当然，Ψ が時間について 1 階の微分方程式

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi \qquad (2.2.39)$$

を満足することを要求する．$\hat{H}$ は ψ について汎関数的依存性をもった線形演算子であるが，確率保存則およびその他の物理的事情により，場のエネルギーを表す Hermite 演算子でなければならない．くわしい事情は第 10 章で説明する予定であるから，これ以上深入りしない．しかし，(2.2.39) と (2.2.19) が全く同じ形をもつという事実だけは注意しておく必要があろう．(2.2.19) は非相対論的粒子の波動関数にかぎって成立する方程式であったが，(2.2.39) は粒子の種類や運動状態の如何にかかわらず，一般的な状態関数に対して成立するはずの普遍的

† ρ と $\boldsymbol{J}$ に含まれる定数 ϵ はこの説明に適合するように定める．なお，ψ が実数であれば (2.2.38) の右辺はゼロとなる．すなわち，Klein-Gordon 方程式の場合，波動関数が実数であるか複素数であるかという区別は，粒子が中性であるか電荷をもっているかという特性に対応して決まる．

な基礎方程式である．波動関数の方程式が状態関数の方程式と同形になるということは非相対論的粒子のSchrödinger方程式の場合に起こる特殊な例外である．この間の事情を承知した上で，一般的な状態関数の方程式(*2. 2. 39*)をふたたびSchrödinger方程式とよぶことがある．今後当分の間，1個の非相対論的粒子を対象にして量子力学の建設に励むが，以上の幸運な事情により，その理論体系は直ちに場の量子論を含む一般の場合に普遍化できる形式をもつことになろう．

――量子力学の発展と普遍化が必然的に場の量子論に到る事情を述べたのであるが，元来，量子論を産み出したPlanck仮説は直ちに電磁場の量子化を招来するものであった．光の粒子説は正に電磁場量子化の直接の産物である．したがって，量子力学は歴史的には場の量子論からはじまったといえるかもしれない．とすれば，量子力学の理論体系の構築を場の量子論から開始する方式があってもよいと思う．読者自ら試みたらいかがであろうか！

§2. 3　定常状態と境界条件

Bohrの古典量子論は原子系の定常状態の存在を仮定することによって成立した．しかしながら，この仮定は古典量子論が出発点において借用した古典物理学の理論体系と鋭く矛盾対立するものである．この意味で古典量子論は無矛盾体系ではなかった．したがって，波動力学の枠内に定常状態という概念を無理なく導入できるかどうかしらべることは，私達にとって極めて重要な課題である．この節ではまず定常状態の一般的な定義を与え，境界条件の設定などを通して，その具体的内容をしらべよう．

a)　定常状態とエネルギー固有状態

力学系の時間的発展はSchrödinger方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi \tag{2.3.1}$$

によって与えられるわけであるが，ハミルトニアン$\hat{H}$が時間依存性をもたない場合，すなわち，$(\partial\hat{H}/\partial t)=0$の場合に話をかぎろう．このとき，$\hat{H}$は空間変数$\boldsymbol{r}$のみの演算子であるから，(*2. 3. 1*)は$t$と$\boldsymbol{r}$について変数分離型となり

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=u(\boldsymbol{r})\chi(t) \tag{2.3.2}$$

という形の特解を許す．uとχはそれぞれ

$$\hat{H}u = Eu \tag{2.3.3 a}$$

$$i\hbar\frac{d\chi}{dt} = E\chi \tag{2.3.3 b}$$

という方程式にしたがう．ここで E は定数である．(2.3.3 b) は簡単に解けて $\chi \propto \exp(-iEt/\hbar)$ となるが，この関数は E が実数であるか複素数であるかによって大そう違った時間的変動をする．定数 E の性格を決めるのは方程式 (2.3.3 a) である．これは正にハミルトニアン $\hat{H}$ の固有値方程式に他ならない．E は演算子 $\hat{H}$ の**固有値**(eigenvalue) であり，u は固有値 E に属する $\hat{H}$ の**固有関数**(eigenfunction) である．いま，(2.3.3 a) に u^* (u の複素共役) をかけ全空間にわたって積分すれば，E を

$$E = \frac{(u, \hat{H}u)}{(u, u)} \tag{2.3.4}$$

と書くことができる．括弧は関数内積を表す．分母 (u, u) は明らかに正の実数である．一方，$(u, \hat{H}u)^* = (\hat{H}u, u) = (u, \hat{H}^\dagger u)$ であるが ($\hat{H}^\dagger$ は $\hat{H}$ の Hermite 共役演算子，p. 69 脚注を見よ)，分子 $(u, \hat{H}u)$ は $\hat{H}$ が Hermite 演算子であれば――$\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ であれば，実数となる．すでに説明したように (p. 69 脚注)，ハミルトニアンの Hermite 性は波動関数に課せられている境界条件と密接に結びついている．境界条件については本節の後段でくわしく説明する．今後，とくに断らないかぎり，$\hat{H}$ が Hermite 性をもつとして話を進めよう．ゆえに，固有値 E は実数である．

一般に固有値はいくつも存在し，それに応じて固有関数も異なるから，添字 ν を付して区別することにしよう．ゆえに，(2.3.3 a) は

$$\hat{H}u_\nu = E_\nu u_\nu \tag{2.3.5}$$

と書いておいた方がよい．固有値が離れ離れの値をとるときは ν として自然数または整数を用いるのが便利であるが，連続固有値の場合は ν もまた連続的なパラメーターとなる．ひとつの固有値にひとつの固有関数しか所属していない場合，固有値は**縮退**(degenerate) していないという．ひとつの固有値に複数の固有関数が属しているときは，縮退しているという．通常，パラメーター ν は運動の自由度に応じて複数存在する．くわしい事情は量子力学の展開とともに次第に明らかになってゆくであろう．なお，$\hat{H}$ に対して (2.2.19) を用い，(2.3.5) を偏微分

方程式としてはっきり書けば，(*1. 8. 23*)そのものになる．元来，この方程式がSchrödinger方程式とよばれていたのである．(*2. 3. 1*)に対比して(*2. 3. 5*)を定常的Schrödinger方程式とよぶことがある．

さて，Schrödinger方程式(*2. 3. 1*)の特解(*2. 3. 2*)は

$$\psi_\nu(\boldsymbol{r}, t) = u_\nu(\boldsymbol{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_\nu t\right) \tag{2.3.6}$$

と書けることになった．この波動関数は特別な意味をもっている．E_νが実数のため$|\exp(-iE_\nu t/\hbar)|=1$が成立し，粒子の存在確率密度は$|\psi_\nu(\boldsymbol{r}, t)|^2=|u_\nu(\boldsymbol{r})|^2$となり時間的に一定となってしまう．存在確率密度が時間依存性をもたないという意味で，(*2. 3. 6*)が与える運動状態を**定常状態**(stationary state)という．定常状態では，運動量空間の確率分布も時間的に一定となる．これを示すため定常状態における確率振幅$A_\nu(\boldsymbol{p}, t)$を求めよう，(*2. 3. 6*)を(*2. 2. 7*)に代入すれば直ちに次式が得られる．

$$A_\nu(\boldsymbol{p}, t) = a_\nu(\boldsymbol{p}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_\nu t\right) \tag{2.3.7a}$$

$$a_\nu(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \int u_\nu(\boldsymbol{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right) d^3\boldsymbol{r}. \tag{2.3.7b}$$

ゆえに，$|A_\nu(\boldsymbol{p}, t)|^2=|a_\nu(\boldsymbol{p})|^2$となり，たしかに運動量確率分布も時間依存性をもたない．定常状態という呼名は正にその物理的内容にふさわしい．

ここで，定常状態(*2. 3. 6*)がエネルギーに相当するハミルトニアンの固有関数になっているという事実に注目しよう．いま，$\hat{H}$の固有関数u_νに対して，“エネルギーが特定の値E_νをもつ状態を表す状態関数”という説明を与えたとすれば，エネルギーが$\hat{H}$の固有値という特定の値をもつ状態が定常状態であるということになる．これはBohrの仮説に似た結果である．古典量子論における定常状態‘仮説’の唐突さに比べれば，極めて自然な‘結果’であり，波動力学という理論枠の合理性をうかがわせる．波動力学にとって，いま，重要な問題は固有値問題(*2. 3. 5*)に対して上のような物理的説明を与えてよいかという点にある．

これまでのところ，エネルギーが一定値をもつ状態の波動関数として明示したのは自由粒子の場合だけである——第1法則(*2. 2. 1*)．そこで波動関数(*2. 2. 1*)がどのような固有値方程式を満足しているかしらべよう．明らかに

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t)=u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{\boldsymbol{p}}t\right),\qquad E_{\boldsymbol{p}}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\tag{2.3.8 a}$$

$$u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})=C\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)\tag{2.3.8 b}$$

は(*2.3.6*)の形をしている(νとして$\boldsymbol{p}$をえらんだ)．自由粒子の場合，ハミルトニアンは$\hat{H}_0=\hat{\boldsymbol{p}}^2/2m$であるから，たしかに$u_{\boldsymbol{p}}$は固有値問題

$$\hat{H}_0u_{\boldsymbol{p}}=E_{\boldsymbol{p}}u_{\boldsymbol{p}}\tag{2.3.9}$$

の解——固有値$E_{\boldsymbol{p}}=\boldsymbol{p}^2/2m$に属する$\hat{H}_0$の固有関数になっている．さらに面白いことに，$u_{\boldsymbol{p}}$は(*2.2.17*)で定義した運動量演算子$\hat{\boldsymbol{p}}=(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r})$の固有値$\boldsymbol{p}$に属する固有関数にもなっている．すなわち，

$$\hat{\boldsymbol{p}}u_{\boldsymbol{p}}=\boldsymbol{p}u_{\boldsymbol{p}}.\tag{2.3.10}$$

これは第1法則の規定，すなわち，波動関数(*2.2.1*)が運動量$\boldsymbol{p}$をもつ運動状態を表しているという規定に対応する固有値方程式である†．このように見てくると，固有値問題(*2.3.5*)の解u_νに対して与えた上記の説明が決して無理な規定でなかったことがわかるであろう．

そこで，波動力学の理論体系に

“力学系のエネルギーがとる値はその力学系のハミルトニアンの固有値にかぎり，エネルギーが特定の固有値をとる状態はその固有値に属するハミルトニアンの固有関数によって表される．”

という規定を盛り込むことにしよう．この意味でハミルトニアンの固有関数が表す状態をエネルギー**固有状態**(eigenstate)とよぶことがある．いま与えた規定は，第1法則，第2法則および第3法則の内容理解を深めてゆく道程上の自然な発展として，容認してよい．事実，エネルギーの値がばらつかず，期待値$(u,\hat{H}u)$が常にE_νを与える状態関数uは(*2.3.5*)を満足しなければならないのである(くわしくは§3.2を見よ)．この規定は，前節に与えた運動法則と独立な新法則ではない．

エネルギーに関するこの規定は直ちに一般の力学量にまで拡張することができ

---

† $\hat{H}_0$と$\hat{\boldsymbol{p}}$は平面波$u_{\boldsymbol{p}}$のつくる関数集団に対してHermite性をもっている．p.69の脚注と次式を参考にせよ：

$$\oint_S u_{\boldsymbol{p}}{}^*u_{\boldsymbol{p}'}d\boldsymbol{f}=(2\pi\hbar)^3|C|^2(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')=0.$$

る．実際，運動量について同質の規定を第1法則と(*2. 3. 10*)のところで見たばかりであった．しかし，一般化の作業は第3章以降にまわそう．

さて，定常状態(*2. 3. 6*)における確率密度と確率流密度は

$$\rho_\nu(\boldsymbol{r}) = |u_\nu(\boldsymbol{r})|^2 \tag{2. 3. 11}$$

$$\boldsymbol{J}_\nu(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar}{2im}\left\{u_\nu{}^*(\boldsymbol{r})\frac{\partial u_\nu(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}} - \frac{\partial u_\nu{}^*(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}}u_\nu(\boldsymbol{r})\right\} \tag{2. 3. 12}$$

のように，$u_\nu(\boldsymbol{r})$ だけで表され時間的に一定となる．この場合，ρ_ν の時間微分は消えるから連続の式は

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{J} = 0 \qquad \text{または} \qquad \oint_{\mathrm{S}} \boldsymbol{J}\cdot d\boldsymbol{f} = 0 \tag{2. 3. 13}$$

となる．Sはある領域を包む閉曲面である．(*2. 3. 13*)は定常状態における確率流が泉なしの流れ，すなわち，連続的な流れになるべきことを示している．この連続条件は，$u_\nu(\boldsymbol{r})$ が(*2. 3. 5*)を満足し，かつ

$$\text{“}u_\nu(\boldsymbol{r}) \text{ と } \frac{\partial u_\nu(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}} \text{ が連続関数である”} \tag{2. 3. 14}$$

ならば実現される．しかし，逆は必ずしも正しくない．すなわち，$\boldsymbol{J}_\nu(\boldsymbol{r})$ が連続的な流れになっていても，$u_\nu(\boldsymbol{r})$ と $\partial u_\nu(\boldsymbol{r})/\partial \boldsymbol{r}$ が連続であるとはかぎらない．(具体例は次節で示す.) 定常状態条件によって要求されるのは $\boldsymbol{J}_\nu$ の連続性であるから，(*2. 3. 14*)の要求は少々強すぎる．しかし，多くの場合，(*2. 3. 14*)は $\boldsymbol{J}_\nu$ の連続条件の代用として利用してよい．連続条件(*2. 3. 14*)は固有値方程式(*2. 3. 5*)を解くさい，境界条件の一部として，考慮しなければならないものである．

——$u_\nu(\boldsymbol{r})$ が定数係数を除外すれば実数であるとき，$\boldsymbol{J}_\nu(\boldsymbol{r})=0$ となる．$\hat{H}$ は普通実数演算子なので，複素数を要求しない境界条件の下では(*2. 3. 5*)は実数解を許す．逆に $\boldsymbol{J}_\nu=0$ を要求すれば，定数係数を除いて u_ν が実数でなければならないことになる．証明は簡単であろう．なお，束縛状態は多くの場合実数のエネルギー固有関数をもち，確率流密度は消える．本節 c) を見よ．

もう一度，定常状態とエネルギー固有関数との関係に話をもどそう．これまでの筋書は，エネルギー固有関数である Schrödinger 方程式の特解(*2. 3. 6*)が時間依存性のない存在確率密度を与えたので，それに定常状態という呼名を与えたというものであった．この話を逆に辿れないだろうか？　すなわち，

“時間的に一定な存在確率密度をもつ状態として定常状態を定義する”

ところから出発し，Schrödinger 方程式だけを用いて，定常状態がエネルギー固有状態(*2. 3. 6*)にかぎることを結論できないだろうか？　この問題をしらべよう．

通常，固有関数列 $\{u_\nu\}$ が完全系をつくるので，Schrödinger 方程式(*2. 3. 1*)の一般解は次のように書ける：

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_{\nu'}c_\nu u_\nu(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_\nu t\right). \qquad (2.3.15)^{\dagger}$$

右辺が Schrödinger 方程式を満足することは，(*2. 3. 15*)を(*2. 3. 1*)に入れ(*2. 3. 5*)を使えば，直ちに証明できる．なお，c_ν は任意定数であるが，初期条件が与えられていれば，それによって決まるはずのものである．さて，波動関数(*2. 3. 15*)が与える存在確率密度は

$$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2=\sum_{\nu'}|c_{\nu'}|^2|u_{\nu'}(\boldsymbol{r})|^2+\sum_{\nu'\neq\nu''}\sum c_{\nu'}^{*}c_{\nu''}u_{\nu'}^{*}(\boldsymbol{r})u_{\nu''}(\boldsymbol{r})\exp\frac{i}{\hbar}(E_{\nu'}-E_{\nu''})t \qquad (2.3.16)$$

である．右辺第2項はもちろん実数であるが，それは

$$\sum_{\nu'\neq\nu''}\sum|c_{\nu'}u_{\nu'}(\boldsymbol{r})||c_{\nu''}u_{\nu''}(\boldsymbol{r})|\cos\left\{\frac{1}{\hbar}(E_{\nu'}-E_{\nu''})t-\gamma_{\nu'}(\boldsymbol{r})+\gamma_{\nu''}(\boldsymbol{r})\right\}$$

と書き直して見れば明らかであろう($\gamma_\nu(\boldsymbol{r})=\arg\{c_\nu u_\nu(\boldsymbol{r})\}$)．(*2. 3. 16*)により，存在確率密度の時間依存性はもっぱらその右辺第2項から出てくることがわかった．すなわち，存在確率密度 $|\psi|^2$ の時間依存性は，(*2. 3. 16*)の右辺に相異なるエネルギー固有値をもつ複数のエネルギー固有関数が共存しているところに，その根源がある．ゆえに，第2項が消えて $|\psi|^2$ が時間的に一定になるためには，(*2. 3. 16*)の右辺の各項が，特定のエネルギー固有値(たとえば E_ν)を残して，すべて消える必要がある．これは正に ψ が(*2. 3. 6*)にかぎるという結果である．したがって，定常状態はエネルギー固有状態に他ならない．‘定常状態’と‘エネルギー固有状態’とは物理的内容において全く同等である．

力学系が定常状態にないときの時間変動を概観しておこう．確率密度の変動な

† 固有値 E_ν が縮退していない場合を想定したが，縮退していても話の筋道が本質的に変わることはない．なお，固有関数列が完全系をつくることの物理的内容，および係数 c_ν がもつ物理的意味については，第3章を参照していただきたい．

ど力学系にとって実質的な時間変化が，相異なるエネルギー固有値をもつ複数のエネルギー固有状態の‘重ね合せ’を原因として出てくるところに，いい換えれば，エネルギーの値の‘不確定’を原因として出てくるところに，量子力学の著しい特徴がある．(*2.3.16*)の右辺第2項の指数関数における時間変数tの係数が$\hbar^{-1}(E_{\nu'}-E_{\nu''})$であることを見れば，$|\psi|^2$の時間的変動は$\hbar(\Delta E)^{-1}$を大よその時間尺度として起こっていることがわかる．ただし，ΔEは(*2.3.15*)の展開に実質的に参加しているエネルギー固有値の範囲を示す目安的なエネルギー幅である．したがって，時間尺度をΔtと書けば

$$\Delta t \sim \hbar(\Delta E)^{-1} \qquad \text{または} \qquad \Delta t \Delta E \sim \hbar \tag{2.3.17}$$

となる．この関係式は時間とエネルギーに関する**不確定性関係**(uncertainty relation)として知られている．この関係から，緩慢な時間的変動はごく狭い幅の中にあるエネルギー固有値をもつエネルギー固有状態だけによって起こること，反対に，急激な時間的変動にはかなり広い範囲のエネルギー固有値をもつエネルギー固有状態が参加していることなどがわかる．

b)　平面波と自由粒子波束

平面波はおそらくもっとも簡単な定常状態であろう．この項では自由粒子問題を取り上げ，平面波とその‘重ね合せ’である自由粒子波束の性質をしらべよう．

平面波(*2.3.8b*)，すなわち，$u_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})=C\exp(i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$が自由粒子ハミルトニアン$\hat{H}_0$と運動量演算子$\hat{\boldsymbol{p}}$の同時的固有関数になっていることはすでに説明した．$\hat{H}_0$だけの固有関数を求めよというならば，$\sin(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$や$\cos(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$でもよいわけであり，必ずしも$u_{\boldsymbol{p}}$のような指数関数を必要としない．しかし，これらの三角関数は演算子$\hat{\boldsymbol{p}}$の固有関数ではない．また，波動現象という面から見れば，このような三角関数は定在波を表すが，$u_{\boldsymbol{p}}$型の指数関数は進行波を表している．演算子$\hat{H}_0$の固有値問題の解として，三角関数をとるか指数関数をとるかは境界条件の設定によって決まる問題である．私達が$\hat{\boldsymbol{p}}u_{\boldsymbol{p}}=\boldsymbol{p}u_{\boldsymbol{p}}$を満足する固有関数$u_{\boldsymbol{p}}$をえらんだということは，境界条件としてあらかじめ，ベクトル$\boldsymbol{p}$の方向に伝搬する進行波を設定していたという事実を意味している．これは運動量が一定値$\boldsymbol{p}$をとるように設計された射出器から出てくる粒子を表現するのに好都合な境界条件である．三角関数を要求する境界条件にふさわしい物理的状況は次節の具体例によって説明する．

さて，平面波 $\boldsymbol{u_p}$ が与える存在確率密度 ρ_p と確率流密度 $\boldsymbol{J_p}$ を求めよう．簡単な計算によって直ちに

$$\rho_p(\boldsymbol{r}) = |C|^2, \qquad \boldsymbol{J}_p(\boldsymbol{r}) = \frac{\boldsymbol{p}}{m}|C|^2 \tag{2.3.18}$$

が得られる．定常状態であるから時間的に一定になるのは当然であるが，空間的にも一定になってしまった．$\boldsymbol{J_p}$ は一様なベクトル場であるから，たしかに泉なしの流れになっており，定常状態に対して要求された連続条件(2.3.13)を満たしている．一方，ρ_p=一定は平面波が全空間にわたって一様にひろがっている事実の反映であり，納得できるが，(2.2.28)の方式で規格化できないことを示している．平面波の規格化は別の方式で実行しなければならない．よく利用される方式として，'箱式規格化' と 'δ 関数式規格化' がある．箱式規格化は粒子を有限な体積 V をもつ箱の中に閉じこめてしまう方法である．このようにすれば，全空間積分が発散することはないから規格化条件(2.2.28)をそのまま使うことができ，$|C|=V^{-1/2}$ を得る．ただし，領域を有限にした代償として，エネルギーと運動量の固有値は連続的な値をとれず，特定の離れ離れの値をとることになる．箱が十分大きければ，領域が有限になったことの効果はほとんど無視してよい．δ 関数式規格化は(2.2.28)を捨て，$(\boldsymbol{u_p}, \boldsymbol{u_{p'}})=\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')$ となるように定数 C をえらぼうとする方式である．δ 関数の Fourier 積分表示†を用いれば，この方式による規格化は $|C|=(2\pi\hbar)^{-3/2}$ を与える．いずれも一長一短があるが，くわしい話は散乱理論(本講座第4巻『量子力学II』第12章)のところに委せよう．ここでは別方式の 'ビーム強度式規格化' について簡単に説明しておく．

平面波 $\boldsymbol{u_p}$ が射出器から一定の運動量 $\boldsymbol{p}$ をもって打ち出されてくる粒子の波動関数として利用できることはすでに述べた．射出器から流れ出す粒子ビームの強度がそれほど強くない場合，粒子ビーム全体がひき起こす現象は1個1個の粒子がつくる現象の '重ね焼き' になっているはずである．したがって，その事実をあらかじめ1個の粒子の波動関数の規格化定数 C の中に植え込んでおいてもよいかもしれない．具体的には，確率流密度の大きさ $|\boldsymbol{J_p}|$ を粒子ビームの流れ強度 N_0(単位時間ごとに単位面積を通過してゆく粒子数)に等置して定数 C を決める

† $\delta^3(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') = (2\pi)^{-3}\int \exp\,[i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}]d^3\boldsymbol{r}.$

方式である．この方式は

$$|C| = (N_0/v)^{1/2} \tag{2.3.19}$$

を与える．ただし，$v=(p/m)$．このようにしておけば，粒子1個の波動関数による確率分布などの計算結果は，自動的に，粒子ビーム全体が(単位時間・単位面積ごとに)ひき起こす現象の累積結果を与えてくれるわけである．物理的立場からいえば大そう便利な方式であるが，数学的運用面から見ると必ずしも具合がよいとはいえない．多くの場合，箱式規格化やδ関数式規格化を用いて理論計算を行い，最後のところでこの方式に乗り換える．なお，(2.3.19)において$N_0=1$とする方式を‘単位流式規格化’という．

無限のひろがりをもつ平面波は数学的理想物と見なすべきものであり，物理的に実現可能な装置によって生まれる波は，いかに平面波に近くても，結局有限なひろがりしかもたない．有限のひろがりをもつ波を総称して**波束**(wave packet)という．ここでは，力が作用していない場合の波束，つまり，自由粒子波束の行動をしらべる．自由粒子波束を表す波動関数$\psi(\boldsymbol{r}, t)$はSchrödinger方程式(2.2.13)に従うが，その一般解はすでに(2.2.15)によって与えられている．(2.2.15)の積分内における要素平面波の振幅$a(\boldsymbol{p}')$は初期条件$\psi(\boldsymbol{r}, 0)=\psi_0(\boldsymbol{r})$を与えることによって定まる．すなわち，

$$\psi_0(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int a(\boldsymbol{p}')\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}\right)d^3\boldsymbol{p}' \tag{2.3.20 a}$$

$$a(\boldsymbol{p}') = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int \psi_0(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}\right)d^3\boldsymbol{r}. \tag{2.3.20 b}$$

まず一般的に波束の行動の特徴をしらべよう．いま，初期波束$\psi_0(\boldsymbol{r})$が平面波$\exp(i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$に極めて近いものと想定する．このとき，$|a(\boldsymbol{p}')|$は$\boldsymbol{p}$のまわりに極めて鋭いピークをもち，$\boldsymbol{p}'$が$\boldsymbol{p}$から離れるにつれて急速に0に近づくはずである．したがって，(2.3.20 a)および(2.2.15)の積分は$\boldsymbol{p}$のまわりの小領域$\Delta\boldsymbol{p}$についての積分で近似してよろしい．積分領域がこのように制限されれば，$\boldsymbol{q}=(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})$についての展開$\boldsymbol{p}'=\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}$および$E_{\boldsymbol{p}'}=E_{\boldsymbol{p}}+(\boldsymbol{q}\cdot\partial/\partial\boldsymbol{p})E_{\boldsymbol{p}}+1/2!\,(\boldsymbol{q}\cdot\partial/\partial\boldsymbol{p})^2E_{\boldsymbol{p}}+\cdots$において，$\boldsymbol{q}$に関して2次以上の項はひとまず無視できるであろう．(非相対論的粒子を扱う(2.2.15)では$E_{\boldsymbol{p}'}=\boldsymbol{p}'^2/2m$であったが，ここでは一応もっと一般的なエネルギー・運動量関係の場合を考えておこう.) ゆえに，(2.2.15)は簡単

な計算の末，次のようにまとめられる：

$$\psi(\boldsymbol{r},t)\cong\Phi\left(\boldsymbol{r}-\frac{\partial E_{\boldsymbol{p}}}{\partial\boldsymbol{p}}t\right)\exp\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-E_{\boldsymbol{p}}t) \qquad (2.3.21\,a)$$

ただし，

$$\Phi(\boldsymbol{R})=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int_{\varDelta\boldsymbol{p}}a(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q})\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}\right)d^3\boldsymbol{q}. \qquad (2.3.21\,b)$$

変域 $\varDelta\boldsymbol{p}$ の狭さのために，積分変数 $\boldsymbol{q}$ の絶対値が極めて小さい値に制限されるので，Φ の $\boldsymbol{R}$ 依存性は極めてゆっくりした変化となる．ただし，$|\boldsymbol{R}|\to\infty$ に対して $\Phi\to0$ となり(数学的には Riemann-Lebesgue の定理)，たしかに有限なひろがりを与えてくれることがわかる．したがって，(2.3.21 *a*)が表す波動は，平面波 $\exp[i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)/\hbar]$ を包絡線関数 $\Phi(\boldsymbol{r}-(\partial E/\partial\boldsymbol{p})t)$ で絞った形の波束である．(2.3.21 *b*)において，$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{r}-(\partial E/\partial\boldsymbol{p})t$ とおけば $\boldsymbol{R}$ が $\boldsymbol{q}$ の関数ではないので，包絡線関数 $\Phi(\boldsymbol{r}-(\partial E/\partial\boldsymbol{p})t)$ は一定の形を保ったまま速度

$$\boldsymbol{v}_{\rm g}=\frac{\partial E}{\partial\boldsymbol{p}} \qquad (2.3.22)$$

で進行する．$\boldsymbol{v}_{\rm g}$ は波動論でいう**群速度**(group velocity)であり，波束が全体として移動するときの速度を表している．非相対論的運動に対しては $\boldsymbol{v}_{\rm g}=\boldsymbol{p}/m$，相対論的運動に対しては $\boldsymbol{v}_{\rm g}=c^2\boldsymbol{p}/E_{\boldsymbol{p}}$ となり，いずれも古典的粒子速度に一致する．前節では，平面波の進行速度(位相速度)が古典的粒子速度を与えないという事実を注意しておいたが，波動力学において古典的粒子速度に対応させるべきものは群速度なのである．

ここまでは，$E_{\boldsymbol{p}'}$ の展開を $\boldsymbol{q}$ の1次で打ち切った場合の結果であった．この近似の特徴は，波束が無変形のまま進行してゆくところにある．次に，$\boldsymbol{q}$ について2次の項まで取り入れてみよう($E_{\boldsymbol{p}'}=\boldsymbol{p}'^2/2m$ の場合，$E_{\boldsymbol{p}'}$ の展開は2次の項 $\boldsymbol{q}^2/2m$ までしかない)．このとき，関数 Φ は(2.3.21 *b*)右辺の積分において $\boldsymbol{R}$ を $\{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}_{\rm g}t-1/2(\boldsymbol{q}\cdot\partial/\partial\boldsymbol{p})(\partial E/\partial\boldsymbol{p})t\}$ でおきかえた式によって与えられる．この積分内の要素平面波は，したがって，$\boldsymbol{v}_{\rm g}+1/2(\boldsymbol{q}\cdot\partial/\partial\boldsymbol{p})\boldsymbol{v}_{\rm g}$ という位相速度をもって進行することになるが，位相速度が $\boldsymbol{q}$ 依存性をもつため，Φ の形は時間とともに崩れてゆくであろう．とくに，位相速度が $\boldsymbol{q}$ に比例して変化するので，$|\boldsymbol{q}|$ が大きい要素平面波は $|\boldsymbol{q}|$ が小さい要素平面波より速く進行し，全体としては波束のひ

ろがりが増大してゆく傾向をもつはずである．しかし，積分領域 $\boldsymbol{\Delta p}$ が十分狭いならば，ひろがり増大の効果はそれほど大きくならない．実際，通常の散乱現象などに現れるような平面波にかなり近い波束の場合には，巨視的距離を飛んだ後でも，波束のひろがりの増大は十分無視できる程度のものである．くわしい議論は散乱理論(本講座第4巻『量子力学II』第12章)のところを見ていただきたい．

次に，$\psi_0(\boldsymbol{r})$ に具体的な関数形を与え，波束の時間的変動を実際に追跡してみよう．用意した関数形は

$$\psi_0(z,r,\theta)=(2\pi^3)^{-1/4}(\Delta z)^{-1/2}(\Delta r)^{-1}\exp\left[-\frac{z^2}{4(\Delta z)^2}-\frac{r^2}{2(\Delta r)^2}\right]\exp\left(\frac{i}{\hbar}pz\right) \tag{2.3.23 a}$$

である．ここでは $\boldsymbol{p}=(0,0,p)$ の方向を z 軸とした円筒座標 $(z,\ r=\sqrt{x^2+y^2},\ \theta=\tan^{-1}(y/x))$ を使って書いた．この波は平面波 $\exp(ipz/\hbar)$ をガウス型の包絡線で絞った波束であるが，波束の中心を原点におき，z 軸に沿って平均 (Δz) の程度，z 軸のまわりに平均 (Δr) の程度のひろがりを与えてある．係数は規格化条件(2.2.28)を満足するようにえらんだ．$\boldsymbol{r}_0=(x_0,y_0,z_0)$ を中心とする波束を扱いたいときは，$x\to x-x_0$, $y\to y-y_0$, $z\to z-z_0$ とおきかえればよい．(2.3.23 a)を(2.3.20 b)に入れて積分を実行すれば†，直ちに

$$a(p_z',p_r',\theta')=(2\pi^3)^{-1/4}(\Delta p_z)^{-1/2}(\Delta p_r)^{-1}\exp\left[-\frac{(p_z'-p)^2}{4(\Delta p_z)^2}-\frac{p_r'^2}{2(\Delta p_r)^2}\right] \tag{2.3.23 b}$$

が得られる．ただし，(Δp_z) と (Δp_r) は，それぞれ

$$(\Delta z)(\Delta p_z)=\frac{\hbar}{2},\qquad (\Delta r)(\Delta p_r)=\hbar \tag{2.3.24}$$

によって (Δz) と (Δr) に結びつけられている．逆に，(2.3.23 b)を(2.3.20 a)に代入すれば(2.3.23 a)が出てくる．(2.3.23 b)が表す $\boldsymbol{p}'$ 分布は，$\boldsymbol{p}$ を中心点として，$\boldsymbol{p}$ 方向に沿って平均 (Δp_z) の程度，$\boldsymbol{p}$ のまわりに平均 (Δp_r) の程度のひろがりをもっている．位置座標についてのひろがり(すなわち，波束のひろがり)と運動量についてのひろがりは無縁ではなく，**不確定性関係**(uncertainty rela-

---

† 積分を実行するには，次の公式を反復利用すればよい：

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp(-\alpha\xi^2-i\beta\xi)\,d\xi=(\pi/\alpha)^{1/2}\exp(-\beta^2/4\alpha)\qquad\left(|\arg\alpha|<\frac{\pi}{2}\right).$$

tion) (2. 3. 24) によって縛られている．たとえば，平面波に近づけようとして Δp_z と Δp_r を小さくすれば Δz と Δr が大きくなるし，逆に，粒子像を強調するため局所集中状態をつくろうとして Δz と Δr を小さくすれば Δp_z と Δp_r が増大する．古典的粒子は確定した位置と運動量をもつことができるから，原理的には，不確定さの目安 $\Delta z, \Delta r, \Delta p_z, \Delta p_r$ すべてをゼロにえらべるはずである．波動性にもとづく不確定性関係 (2. 3. 24) は古典力学にはない量子力学の著しい特徴である．不確定性関係については§3. 2 でふたたび議論する．

次に波束の運動を解明しよう．(2. 3. 23 b) を (2. 2. 15) に入れ脚注(p. 86)の公式を用いて積分を計算すれば，直ちに

$$\psi(z, r, \theta, t) = (2\pi^3)^{-1/4}\left[(\Delta z)+\frac{i\hbar t}{2m(\Delta z)}\right]^{-1/2}\left[(\Delta r)+\frac{i\hbar t}{m(\Delta r)}\right]^{-1}$$
$$\cdot\exp\left[-\frac{\left(z-\dfrac{p}{m}t\right)^2}{4(\Delta z)^2+i\dfrac{2\hbar t}{m}}-\frac{r^2}{2(\Delta r)^2+i\dfrac{2\hbar t}{m}}\right]\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(pz-\frac{p^2}{2m}t\right)\right] \tag{2. 3. 25}$$

が得られる．ただし，(2. 3. 24) を用い，すべてを座標のひろがり $\Delta z, \Delta r$ によって整理しておいた．存在確率密度は

$$|\psi(z, r, \theta, t)|^2 = (2\pi^3)^{-1/2}\left[(\Delta z)^2+\frac{(\Delta p_z)^2t^2}{m^2}\right]^{-1/2}\left[(\Delta r)^2+\frac{(\Delta p_r)^2t^2}{m^2}\right]^{-1}$$
$$\cdot\exp\left[-\frac{\left(z-\dfrac{p}{m}t\right)^2}{2\left\{(\Delta z)^2+\dfrac{(\Delta p_z)^2t^2}{m^2}\right\}}-\frac{r^2}{(\Delta r)^2+\dfrac{(\Delta p_r)^2t^2}{m^2}}\right] \tag{2. 3. 26}$$

となる．ここでは，一部分(時間の係数)をもう一度 Δp_z と Δp_r にもどして整理しておいた．この式から明らかなように，波束の中心は古典的粒子速度 $\boldsymbol{p}/m$ で進行し，ひろがりは $\Delta z\to\sqrt{(\Delta z)^2+(\Delta p_z)^2t^2m^{-2}}$ および $\Delta r\to\sqrt{(\Delta r)^2+(\Delta p_r)^2t^2m^{-2}}$ のように増大する．ひろがりが増大する速さは大体 $(\Delta p_z)/m$ および $(\Delta p_r)/m$ を目安として考えればよい．中心が古典的粒子のように等速直線運動をするということ，およびひろがりが増大するという事実が自由粒子波束の特徴である．これは一般論によってすでにわかっていた性質の確認である．

なお，波束を表す一般式 (2. 2. 15) は，前の項目で与えたエネルギー固有状態の

共存を示す式(*2. 3. 15*)の特別な場合になっている．自由粒子波束の場合，近似式 $E_{p'}-E_p \cong (\partial E_p/\partial \boldsymbol{p})\boldsymbol{q}$ を考慮すれば，$\Delta E \sim v_g \Delta p_z$ とおいてよかろう．したがって，(*2. 3. 17*)から時間変動の尺度を求めれば，$\Delta t \sim \hbar(\Delta E)^{-1} \sim (\Delta z)/v_g$ となり，波束の長さ程度の距離を群速度で通過する程度の時間を表している．これは当然予期された結果である．しかし，群速度と同じ速度で移動する運動座標系に乗って観測すれば，波束の中心は原点に居座ったまま動かないから，波束の移動による時間変動は起こらない．このときは $\partial E_p/\partial \boldsymbol{p}=0$ であるから $\Delta E \sim (\Delta \boldsymbol{p})^2/m$ となり，時間変動の尺度 $\Delta t \sim \hbar(\Delta E)^{-1}$ はひろがりの増大分が元のひろがりと同程度になるまでの時間を表す．これも当然であろう．

さて，運動量がほぼ一定の値をとる波束を考えよう．不確定性関係によれば，この波束の空間的なひろがりはかなり大きくなるだろう．とはいっても，これは微視的尺度で見たときの話であるから，巨視的尺度で見直せばまだまだ極めて小さいと考えてよい場合が普通である．すなわち，巨視的な眼で見れば，このような波束は運動量と位置の確定した古典的な点状粒子のように振舞う．数量的にいえば，Planck 定数 $\hbar$(に比例する $\hbar/\Delta p_z$ などの量)を無視できるような巨視的尺度の上での話である．これは自由粒子の場合であるが，力が作用していても，その力の場が波束の長さ程度の距離では目立って変化しないとき，波束はやはり古典的粒子のように見えるだろう．すなわち，力の場の分布や周囲の状況が巨視的であれば，量子力学的粒子を表す波束はちょうど古典的粒子のように行動する．もう一度§2.1の終りの部分の議論を想い出していただきたい．

c)　1次元問題と境界条件——束縛状態と散乱状態

定常状態の性質を研究する手始めとして簡単な1次元問題を取り上げよう．1次元問題といっても架空の話ではなく，ある方向(たとえば x 軸方向)の変化に比べて他方向(y, z 軸方向)の変化が無視できるようなとき，しばしば現実の問題として登場する．この場合，方程式(*2. 3. 5*)は(*2. 2. 19*)のハミルトニアンに対して

$$\frac{d^2u_\nu(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E_\nu-V(x))u_\nu(x)=0 \qquad (2.3.27)$$

となるが，境界条件を与えなければ，この方程式の数学的性格も物理的内容も確定しない．古典力学と対応させながら話を進めてゆこう．

古典的1次元運動はエネルギー保存則の与える式 $v=\pm\sqrt{2(E-V(x))/m}$ によ

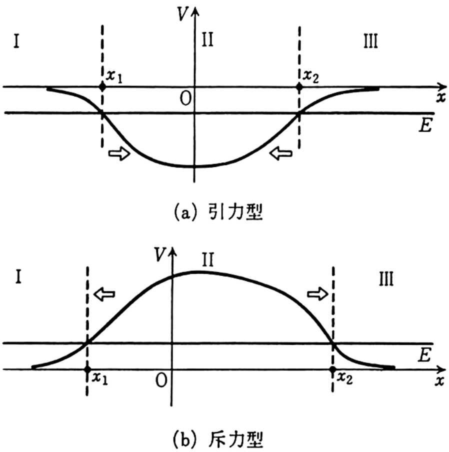


図2.4 1次元ポテンシャルの例

って大体の様子を知ることができる．すなわち，$E>V(x)$ が成立するところだけが運動可能領域であり，粒子は $E<V(x)$ の領域に進入できない．$E=V(x)$ の点は**回帰点**(turning point)とよばれる．典型的な場合として，図2.4のポテンシャルによる運動を考えよう．(a)は中に向う力を与える引力型であるが，(b)は外へ向う力をもつ斥力型である(矢印は力の向きを示す)．いずれも，無限遠でゼロとなる．x_1 と x_2 はエネルギー E に対応する回帰点を示す．(a)の場合，負のエネルギー E に対応する運動可能領域は x_1 と x_2 の間(領域II)にかぎられ，粒子はポテンシャルによって束縛された運動状態にある．これを**束縛状態**(bound state)という．(b)の場合には，エネルギー E(正であるが max V より小)に対応する運動可能領域は $x<x_1$(領域 I)および $x>x_2$(領域 III)であり，左方(または右方)から投入された粒子は x_1(または x_2)ではね返されて左方(または右方)へもどってゆくだけであり，決してポテンシャルの山を抜けて右方(または左方)へ進むことはできない．これはポテンシャルとの衝突現象であり，**散乱状態**(scattering state)とよぶ．また，エネルギー E がいたるところポテンシャルより大きい場合，(a)でも(b)でも，左方(または右方)から投入された粒子は，はね返えされずに右方(または左方)へ通り抜ける．以上が古典的運動の特徴である．

波動力学においても，$E-V$ の正負はエネルギー固有関数 u に大きな影響を及ぼす．古典的運動可能領域 $E>V$ では u は振動型関数であるが，不可能領域 $E<V$ では指数型関数となる．この事実を座標幾何学的考察によって説明しよう．ま

ず，(*2. 3. 27*)から

$$E_\nu \gtrless V \quad \text{に対応して} \qquad \frac{1}{u_\nu}\frac{d^2u_\nu}{dx^2} \lessgtr 0$$

が得られる．2階微分は u_ν-x 平面における u_ν の曲線の曲率を与えるので，(i) $E_\nu > V$ の場合，曲線は x 軸の上では上方に凸，下では下方に凸となって振動型であるが，(ii) $E_\nu < V$ の場合，x 軸の上では上方に凹，下では下方に凹となって指数型になることがわかる．古典的回帰点は u_ν の曲線の反曲点となる．図2.4の場合，(a)のIIと(b)のIおよびIIIは振動型，(a)のIおよびIIIと(b)のIIは指数型の固有関数をもつ．波動力学においては，波動関数および存在確率密度は古典的な運動不可能領域でも値をもち，粒子が見出される可能性を与えるが，これは古典論にはない著しい特徴である．以上の数学的知識をもとにして，エネルギー固有関数に課すべき境界条件を考えよう．

束縛状態　図2.4(a)の場合である．(*2. 3. 27*)の E_ν が図の E であるが，もちろん，負の値をとる．古典的には粒子は領域II内に束縛されるが，波動力学でも似たような状況を期待している．波動力学の場合，領域IIの外でも固有関数は値をもち，指数型の変化をする．指数型には増大型と減少型があるが，束縛状態という以上，存在確率密度 $|u_\nu|^2$ が領域IIをはなれるにつれて指数的に増大することは許されない．これが境界条件設定の物理的前提である．したがって，束縛状態に対応する境界条件は少くとも

$$|x| \to \infty \quad \text{に対して} \qquad |u_\nu| \to 0 \tag{2.3.28}$$

でなければならない．より正確にいえば，(*2. 3. 27*)の $|x|\to\infty$ に対する漸近形

$$\frac{d^2u_\nu}{dx^2} - \kappa_\nu{}^2 u_\nu = 0, \qquad \kappa_\nu = \sqrt{\frac{2m|E_\nu|}{\hbar^2}} \tag{2.3.29}$$

の解 $\exp(\pm\kappa_\nu|x|)$ の内，$\exp(-\kappa_\nu|x|)$ に接続する解[†]をえらぶべきである．これが無限遠点における境界条件であるが，さらに連続条件(*2. 3. 14*)が加わる．両者をまとめて‘束縛状態に対する境界条件’とよぶことにしよう．この境界条件を満足する関数集団に対しては $\hat{H}$ と $\hat{p}$ は Hermite 的である(p. 69 の脚注参照)．

この境界条件は，エネルギー E_ν に，負ではあっても任意の値を許したままで

---

† 厳密にはさらに多項式因子があってもよい．それでも，固有関数は $|x|\to\infty$ に対して漸近的な意味で(*2. 3. 29*)を満足する．

は，満足することができない．その状況を見るため，試みに，ポテンシャルの底に近い値 E_0' をエネルギー E_ν に与えてみよう．曲線 u_ν の曲率は $(d^2u_\nu/dx^2)=-(2m/\hbar^2)(E_\nu-V)u_\nu$ に比例するから，底に近い値ではあまり大きい曲率は得られず，E_0' に対応する曲線は図 2.5(E_0') のようになるだろう．この場合，右方無限遠の境界条件を優先的に満足させてあるが，曲率が小さいため曲り切れず，左方無限遠の境界条件を満たせなかったのである．そこでエネルギーの値をかなり引き上げて $E_0''(>E_0')$ にしよう．その場合の曲線が図 2.5(E_0'') である．今度は曲りすぎて左方無限遠の境界条件に適合しなくなった．したがって，両者の中間 $E_0''>E_0>E_0'$ にちょうどよいエネルギーの値 E_0 があり，図 2.5(E_0) のように，左右両無限遠における境界条件を満足させることができるだろう．こうしてエネルギー固有値 E_0 とそれに属する固有関数 u_0 が決まった．いまの議論において連続条件(*2.3.14*)が重要な役割を演じていることに注意してほしい．連続条件がなければ，エネルギーが勝手な値をとっても(*2.3.28*)を満足させることができるからである．以上の操作が不可能な場合，束縛状態という定常状態は存在しない．

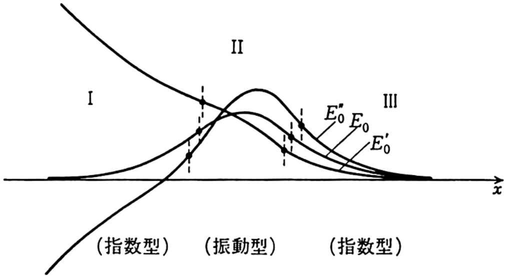


図 2.5 エネルギーの値と無限遠における有様．右方無限遠の境界条件を優先的に満足させてある．古典的回帰点(・印)は曲線の反曲点となっている

ポテンシャル V が十分強ければ，エネルギー固有値はただひとつとはかぎらず，多数存在しうる．その場合，エネルギー固有関数はその固有値に応じて図 2.6 のようになるであろう．固有値の大きさの順序 $E_0<E_1<E_2<\cdots$ は固有関数 $u_0, u_1, u_2, \cdots$ の曲率の順序であることはいうまでもない．なお，この番号はちょうど固有関数のゼロ点の数，すなわち，**節**(node)の数になっているが，これは固有状態を区別する**量子数**(quantum number)として利用することができる．こうして，安定な束縛状態が特定のエネルギー固有値をもつ定常状態として実現することが

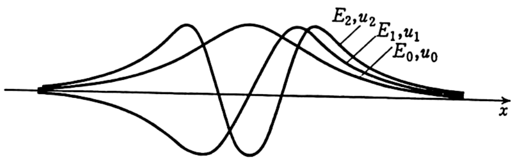


図 2.6　束縛状態のエネルギー固有関数

わかった．これは波動力学の理論体系が与える当然の‘結果’である．一方，古典量子論は出発点においてこの種の事柄を唐突な‘仮説’として設定したのであった．この点を銘記しておいてほしい．

——図 2.4(a) のポテンシャルは正のエネルギーをもつ束縛状態を許さない．なぜならば，いたるところ $E>V$ であり全領域が振動型となるため，境界条件 (2.3.28) を満足させられないからである．正のエネルギーをもつ定常状態は別の境界条件にしたがう散乱状態である．なお，いたるところ $E<V$ となる場合も (2.3.27) は解をもたない．このとき，全領域が指数型になり曲率を反転させてくれる振動型の領域がないため，(2.3.28) は成立しないのである．

さて，束縛状態固有関数は定数因子を除けば通常実数である．これは方程式 (2.3.27) と境界条件の実数性から理解できよう．ゆえに，確率流密度はいたるところ消える．これは束縛状態の物理的内容から予想することができる．束縛状態では古典的粒子は回帰点(x_1 と x_2)の間を往復運動するが，これに対応する波動力学的運動状態は右向きと左向きの進行波の重ね合せである定在波によって表される．定在波の場合，粒子の存在確率が一方にだけ流れることはない．

最後に，$V(x)=V(-x)$ の場合に成立する空間反転対称性にふれておこう．このとき，ハミルトニアンは x を $-x$ に取り換える**空間反転**(space inversion)変換に対して不変である．さらに，束縛状態境界条件も，この変換に対して不変になっている．ゆえに，$u_\nu(x)$ が(2.3.27)の束縛状態を表す解であるとすれば，$u_\nu(-x)$ も同じ方程式の同じ境界条件にしたがう解となる．固有値 E_ν が縮退していなければ——1次元問題では多くの場合縮退していないが，同じ固有値 E_ν に2個以上の独立な固有関数が付属しているはずがない．したがって，$u_\nu(-x)$ と $u_\nu(x)$ とは本質的に同じ関数であり，$u_\nu(-x)=\varepsilon u_\nu(x)$ が成立する必要がある．ただし，ε は定数である．この式に $u_\nu(x)=u_\nu(-(-x))=\varepsilon u_\nu(-x)$ を代入すれ

ば，$\varepsilon^2=1$ を得る．ゆえに，定数 ε は $+1$ または -1 にかぎられる．これはエネルギー固有関数が

$$u_\nu^{(+)}(-x) = u_\nu^{(+)}(x), \tag{2.3.30 a}$$

$$u_\nu^{(-)}(-x) = -u_\nu^{(-)}(x) \tag{2.3.30 b}$$

の内，いずれかの性質をもつことを意味している．この性質を**パリティ**(parity)または**偶奇性**という．(*2.3.30 a*)の性質をもつ $u_\nu^{(+)}(x)$ にパリティ $+$，(*2.3.30 b*)となる $u_\nu^{(-)}(x)$ にパリティ $-$ を指定する．ハミルトニアンが空間反転不変であるため，ある時刻に一定のパリティをもった波動関数はその後のいかなる時刻においても同じパリティをもちつづけることになる．すなわち，パリティは空間反転不変性の与える保存量であり，エネルギー固有状態の特性を記述するひとつの‘量子数’と考えてよい．くわしくは第5章で説明しよう．

散乱状態　次に図2.4(b)の衝突問題を考えよう．古典的粒子の運動はすでに述べたとおり明らかに非周期運動となるので，周期運動であった束縛状態と違って，定常状態として扱えないように見える．しかし，波動力学の場合，これを定常状態として扱うことができる！　波動力学においては，波動関数は1個の粒子の運動状態を記述するものでありながら，同時に，1個の粒子に関する測定結果を多数集めて‘重ね焼き’した結果を与えるという事実を想い起こそう．たとえば，平面波(*2.3.8*)は定常的な流れとなっている一様な粒子ビームを表すものでもあった．したがって，この一様な粒子ビームをポテンシャルの山に注ぎかければ，一定の割合で反射する粒子流と透過する粒子流が生まれ，全体として定常的な流れが実現するだろう．(図2.4(b)の場合，古典的には透過粒子流は存在しない．しかし，波動力学では波動関数は領域IIでもゼロでない値をもち，連続条件によって領域IIIに進行波——すなわち，透過粒子流を供給することができる.)このような定常的な流れを定常状態として，すなわち，方程式(*2.3.27*)の解として定式化しようというのである．そのため，境界条件としては上述の状況を取り入れ

$$\left.\begin{aligned} u_p(x) &\xrightarrow[x\to-\infty]{} C\left\{\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right)+R\exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right)\right\} \\ &\xrightarrow[x\to+\infty]{} CT\exp\left(\frac{i}{\hbar}px\right) \end{aligned}\right\} \tag{2.3.31}$$

とおく必要がある．第1行第1項が入射粒子流，第2項が反射粒子流，第2行が

透過粒子流に対応していることはいうまでもなかろう．ただし，C, R, T は定数である．この場合，エネルギーは粒子射出器の設定状況によって決まる連続的な正の実数値をとり，初期運動量 p と $E_p=(p^2/2m)$ の関係にある(添字 ν として p を採用した)．境界条件(2.3.31)は方程式(2.3.27)と矛盾しない．なぜならば，$|x|\to\infty$ に対して $V\to 0$ となるので方程式(2.3.27)は漸近的に

$$\frac{d^2u_p}{dx^2}+k^2u_p=0, \qquad k=\frac{p}{\hbar}=\sqrt{\frac{2mE_p}{\hbar^2}} \tag{2.3.32}$$

となり，(2.3.31)の右辺を解としてもつからである．境界条件(2.3.31)にしたがう(2.3.27)の解 u_p をハミルトニアン $\hat{H}$ の‘散乱状態固有関数’とよぶ．これもひとつのエネルギー固有状態である．なお，この境界条件に対して $\hat{H}$ は Hermite 性をもつ．

さて，入射波，反射波，透過波をそれぞれ $u_p^{(\mathrm{i})}(x)=C\exp(ipx/\hbar)$，$u_p^{(\mathrm{r})}(x)=CR\exp(-ipx/\hbar)$，$u_p^{(\mathrm{t})}(x)=CT\exp(ipx/\hbar)$ とおこう．定数 C は入射波の規格化によって決める．いま，‘ビーム強度式規格化’ $C=\sqrt{N_0/v}$ ((2.3.19)を見よ)を採用すれば，$u_p^{(\mathrm{i})}$ は毎秒 N_0 個ずつ入射してくる粒子ビームを表す．このとき，(2.3.12)の u_ν に $u_p^{(\mathrm{i})}$ を入れてつくった入射確率流密度 $J_p^{(\mathrm{i})}$ は入射粒子流強度 N_0 そのものとなる．同じ手続によってつくった反射確率流密度 $J_p^{(\mathrm{r})}$ および透過確率流密度 $J_p^{(\mathrm{t})}$ は，それぞれ，反射粒子流強度 $N^{(\mathrm{r})}$ および透過粒子流強度 $N^{(\mathrm{t})}$ になるはずである．すなわち，簡単な計算により，$J_p^{(\mathrm{i})}=v|C|^2=N_0$，$N^{(\mathrm{r})}=|J_p^{(\mathrm{r})}|=v|C|^2|R|^2=N_0|R|^2$，$N^{(\mathrm{t})}=J_p^{(\mathrm{t})}=v|C|^2|T|^2=N_0|T|^2$ が得られる．($J_p^{(\mathrm{r})}$ は負の値をとるが，これは反射粒子流が x 軸の負方向に進行する事実の反映として理解されよう.) これから，‘反射確率’および‘透過確率’は，それぞれ

$$P^{(\mathrm{r})}=\frac{N^{(\mathrm{r})}}{N_0}=|R|^2 \tag{2.3.33 a}$$

$$P^{(\mathrm{t})}=\frac{N^{(\mathrm{t})}}{N_0}=|T|^2 \tag{2.3.33 b}$$

のように得られることがわかる†．実験による測定量は $N_0, N^{(\mathrm{r})}, N^{(\mathrm{t})}$ であるが，(2.3.33)はその比 $(N^{(\mathrm{r})}/N_0)$ および $(N^{(\mathrm{t})}/N_0)$ がそれぞれ理論的に求められるはずの量 $|R|^2$ および $|T|^2$ に等しいことを示している．これが図2.4(b)の衝突問題

† ‘単位流式規格化’をしておけば $P^{(\mathrm{r})}=|J_p^{(\mathrm{r})}|$，$P^{(\mathrm{t})}=J_p^{(\mathrm{t})}$.

に対する波動力学の理論的予言である．なお，確率流の連続条件から直ちに確率保存則

$$P^{(r)}+P^{(t)}=1 \qquad \text{または} \qquad |R|^2+|T|^2=1 \qquad (2.3.34)$$

が得られるが，証明は読者に委せよう．R を反射係数，T を透過係数ということがある．

こうして，図2.4(b)の衝突問題は R と T を求める問題に帰着することがわかった．R と T は，境界条件(*2.3.31*)の下に方程式(*2.3.27*)を解いて，固有関数 u_p と同時に得られるはずの量である．これを求める手続を定式化しておこう．まず，領域 I, II, III で別々に(*2.3.27*)を解き，独立な特解を求めることからはじめる．(*2.3.27*)は2階の線形常微分方程式であるから，特解は各領域ごとに2個ずつあり，一般解はその線形結合で与えられる．したがって，一般解は各領域ごとに2個ずつ計6個の任意定数を含む．境界条件は領域 III が右方進行波だけになるよう指示しているので，この領域の解に含まれる定数は1個減る．さらに，入射波振幅 C を規格化条件によって決めてしまえば，他の定数の C に対する比4個が未定のまま残る．この比は領域 I では R，領域 III では T であるが，他の2個は領域 II の解に含まれる．ここで境界点 x_1 と x_2 における連続条件(*2.3.14*)を設定すれば，4個の未定定数を決めるのに必要・十分な4個の非同次1次代数方程式が生まれる．これを解いて R と T(さらに他の2個の定数，したがって，u_p 全体)を求めればよい．この手続の数学的検証を通して，方程式(*2.3.27*)が任意の正実数 E_p と境界条件(*2.3.31*)に対して解をもつことの証明が完成するはずである．厳密な証明は，ポテンシャルの関数形と特解の性質との関係など，くわしい議論を必要とするので，ここでは深入りしない．簡単な例題については次節で説明しよう．

図2.4(b)の場合，ゼロでない透過確率の存在が古典力学にはない純粋の量子効果であった．図2.4(a)のポテンシャルに対しても，(b)型と同じような衝突問題が量子効果によって成立することを注意しよう．古典的には，正実数のエネルギーをもつ粒子を(a)型ポテンシャルに送り込めば，はね返されることなく通り抜ける．しかし，波動現象として見れば，(a)型ポテンシャルは異種媒質層の存在を意味するので，反射が起こっても不思議はない．事実，(a)型ポテンシャルをもつ方程式(*2.3.27*)は任意の正実数のエネルギーと境界条件(*2.3.31*)の下

で解をもつことができる．こうして，ゼロでない反射確率が現れるが，(a)型の場合，これが純粋の量子力学的効果なのである．

これまでは，衝突問題を左からの粒子投入に対して定式化してきた．ここでは右からの粒子投入を考え，左方投入問題との関係をしらべる．まず，左と右とをはっきり区別するため，ポテンシャルの左右同水準 ($\lim_{|x|\to\infty} V=0$) をやめ，$\lim_{x\to-\infty} V=V_1$ および $\lim_{x\to+\infty} V=V_2(\neq V_1)$ としておこう．ただし，$E_p>V_1$，$E_p>V_2$ とすれば，反射と透過が共存しうる．このとき，左右無限遠での運動量はそれぞれ $p_1=\sqrt{2m(E_p-V_1)}$，$p_2=\sqrt{2m(E_p-V_2)}$ となる．いま，(2.3.31)第1行の p を p_1 で，第2行の p を p_2 でおきかえれば，このポテンシャルに対する左方投入問題の散乱状態境界条件が得られる．左方投入をはっきりさせるため，固有関数やすべての定数に番号1をつけておこう．すなわち，規格化は $C_1=\sqrt{N_0/v_1}$ ($v_1=p_1/m$) であり，反射係数は R_1，透過係数は T_1 である．問題の解き方は左右同水準の場合と本質的には同じであるが，$p_1\neq p_2$ による修正が必要となる．すなわち，$J_p^{(\mathrm{i})}=N_0$，$|J_p^{(\mathrm{r})}|=|R_1|^2N_0$ は同じだが，$J_p^{(\mathrm{t})}=(v_2/v_1)|T_1|^2N_0$ にその相違が現れる ($v_2=p_2/m$)．ゆえに，反射確率と透過確率はそれぞれ

$$P_1^{(\mathrm{r})}=|R_1|^2,\qquad P_1^{(\mathrm{t})}=\frac{v_2}{v_1}|T_1|^2:\qquad P_1^{(\mathrm{r})}+P_1^{(\mathrm{t})}=1 \tag{2.3.35}$$

となる．次に，このポテンシャルに対する右方投入問題を設定したい．それは明らかに境界条件

$$\left.\begin{aligned} u_{p2}(x) &\xrightarrow[x\to+\infty]{} C_2\left\{\exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_2x\right)+R_2\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_2x\right)\right\} \\ &\xrightarrow[x\to-\infty]{} C_2T_2\exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_1x\right) \end{aligned}\right\} \tag{2.3.36}$$

の下で可能となる．左方投入問題と同様の経過で

$$P_2^{(\mathrm{r})}=|R_2|^2,\qquad P_2^{(\mathrm{t})}=\frac{v_1}{v_2}|T_2|^2:\qquad P_2^{(\mathrm{r})}+P_2^{(\mathrm{t})}=1 \tag{2.3.37}$$

のように，反射確率と透過確率が得られる．

さて，左方投入問題の解 u_{p1} と右方投入問題の解 u_{p2} はいずれも(2.3.27)の解である．すなわち，

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_{p1}}{dx^2}+Vu_{p1}=E_pu_{p1}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_{p2}}{dx^2}+Vu_{p2}=E_pu_{p2}$$

が成立する．第1式に u_{p2} をかけ，第2式に u_{p1} をかけて，辺々引き算すれば次式が得られる．

$$\frac{d}{dx}\left\{u_{p2}\frac{du_{p1}}{dx}-u_{p1}\frac{du_{p2}}{dx}\right\}=0$$

ゆえに

$$\lim_{x\to-\infty}\left\{u_{p2}\frac{du_{p1}}{dx}-u_{p1}\frac{du_{p2}}{dx}\right\}=\lim_{x\to+\infty}\left\{u_{p2}\frac{du_{p1}}{dx}-u_{p1}\frac{du_{p2}}{dx}\right\}.$$

この式に(左右同水準でないための修正を施した)(*2. 3. 31*)と(*2. 3. 36*)を代入すれば，直ちに

$$p_1T_2=p_2T_1 \tag{2.3.38}$$

が得られる．この式を使えば(*2. 3. 35*)と(*2. 3. 37*)から

$$P_1^{(t)}=P_2^{(t)},\qquad P_1^{(r)}=P_2^{(r)} \tag{2.3.39}$$

が出てくる．すなわち，反射確率と透過確率は左方投入に対しても右方投入に対しても同じ値をとる．これを**相反関係**(reciprocity)という．一般には Schrödinger 方程式の時間反転不変性から導かれる性質である(散乱理論(本講座第4巻『量子力学II』第12章)を見よ)．なお，$P_1^{(r)}=P_2^{(r)}$ から

$$|R_1|=|R_2| \tag{2.3.40}$$

も成立する．また，Schrödinger 方程式から $\{u_{p2}^*(du_{p1}/dx)-u_{p1}(du_{p2}^*/dx)\}=$ 一定という関係式を導くこともできるが，これは次式を与える：

$$p_2T_1R_2^*=-p_1T_2^*R_1. \tag{2.3.41}$$

ここで，束縛状態と散乱状態の相異点を2,3あげておこう．第1の相異点はエネルギー固有値にある．束縛状態ではエネルギー固有値は，固有値問題を解いてはじめて得られる解であり，離れ離れに分布する特定の値をとる．一方，散乱状態のエネルギー固有値は，実験装置の設定などにより，固有値方程式を解く前からあらかじめ与えられているものであり，連続的な正の実数値をとる．第2の相異点は散乱状態境界条件が固有関数に対して本質的な複素数性を要求しているところにある．したがって，確率流密度は決してゼロにならないが，これは衝突現象の物理的内容から見て当然であろう．一方，すでに指摘したように，束縛状態

の確率流密度は通常消えてしまう．第3の相異点として空間反転不変性の現れ方の違いを説明しよう．$V(-x)=V(x)$ が成立しても，散乱状態の境界条件は明らかに空間反転に対して不変ではないので，束縛状態の場合と違って，固有関数が一定のパリティをもつことはない．しかし，ハミルトニアンの空間反転不変性は別の形で固有関数の上に反映する．境界条件(2.3.31)において，x を $-x$ におきかえると，ちょうど右方投入問題の条件(2.3.36)が得られる(この場合，$p_1=p_2$)．ゆえに，空間反転対称性は $R_1=R_2$ と $T_1=T_2$ を保証してくれるのである．

——$V(-x)\neq V(x)$ の場合，$V(x)$ に対する左方(右方)投入問題の反射係数と透過係数は，$V(-x)$ に対する右方(左方)投入問題の反射係数と透過係数に等しい．

散乱状態固有関数 $u_p(x)$ は全領域にわたってひろがる波動を表している．平面波がそうであったように，この関数も数学的理想化であり，物理的状況を忠実に表現したものではない．現実の実験装置がつくる波動は肝心の点で $u_p(x)$ に近いとはいっても，有限のひろがりしかもたない．$u_p(x)$ に近く有限なひろがりをもつ波動は，やはり，波束として表現することができる．しかしながら，波束の散乱はもはや定常状態の問題ではなく，非定常的な時間変化過程として定式化し直さなければならない．非定常的な現象として記述するには，はじめ十分遠方にあった自由粒子波束がポテンシャルに出会って乱れだし，反射波束と透過波束にわかれてポテンシャル領域を通り過ぎる有様を克明に追いかける必要がある．簡単なポテンシャルを具体的に与えて，この作業を実行すると大そう面白いが，これは読者に委せよう．なお，反射確率や透過確率などについての理論的予言が，定常状態として扱った場合と非定常な現象として見た場合とで異なるわけではない．この辺の事情についての詳細な解説は，より一般的な場合に対してであるが，散乱理論(本講座第4巻『量子力学II』第12章)のところを見ていただきたい．

この節では1次元定常状態問題に対する境界条件しか論じなかったが，3次元空間における運動を対象にした場合や多粒子系または光の吸収・放出の取り扱いなど，より複雑な物理現象にふさわしい境界条件の設定方法に関しては，量子力学理論体系の展開や応用とともに次第に明らかにしてゆく予定である．

§2.4　簡単な定常状態

簡単ではあるが基本的ないくつかの具体例を扱って，1次元ポテンシャルによる粒子の束縛と散乱をしらべよう．これは前節で述べた定常状態の具体的内容を知るためではあるが，同時に，量子力学理論体系の構築にとって必要な一般的手法を予見するためでもある．

a)　階段ポテンシャル

図2.7の関数形，すなわち，式で書けば

$$V(x) = \pm V_0\theta(x) \tag{2.4.1}$$

という関数をもつポテンシャルによる力の作用を考えよう．$\theta(x)$ は $x>0$ のとき1，$x<0$ のとき0となる単位階段関数である．なお，$V_0>0$ とする．この場合，原点だけで値をもつ力 $\mp V_0\delta(x)$ が現れるが†，$x=0$ を除く全領域で自由粒子運動をするはずである．このような力では束縛状態は実現しない．物理的には，左方から投入された粒子が原点におかれたポテンシャルの壁に衝突するという現象が問題になる．右方からの投入は後で考えよう．前節で述べたように，運動量一定の定常流ビームがひき起こす衝突・散乱現象は定常状態問題として定式化できる．図2.7(a)の場合，入射粒子のエネルギー $E_p=(p^2/2m)$ (p は初期運動量)が V_0 より大きいか小さいかによって，現象の様相がかなり違うので，両方の場合を別々に議論しなければならない．便宜上，$x<0$ を領域I，$x>0$ を領域IIとよぶ．

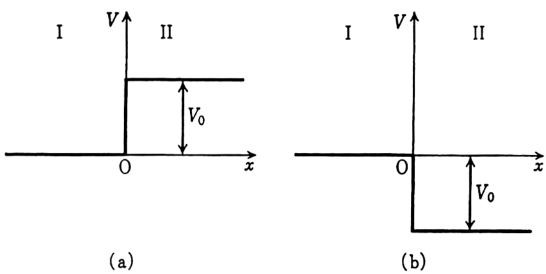


図2.7　階段ポテンシャル

(i)　$V(x)=V_0\theta(x)$ に対する $E_p<V_0$ の場合．方程式(2.3.27)は領域Iでは(2.3.32)であるが，領域IIでは

† 単位階段関数の微分は δ 関数となる：$d\theta(x)/dx=\delta(x)$．

$$\frac{d^2u_p}{dx^2}-\bar{\kappa}^2u_p=0, \qquad \bar{\kappa}=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E_p)} \tag{2.4.2}$$

となる．$\bar{\kappa}$ は正の実数である．解は $\exp(\pm\bar{\kappa}x)$ であるが，左からの粒子投入という物理的状況に対して，右方無限遠で限りなく増大する解 $\exp(+\bar{\kappa}x)$ を容認することはできない．この場合，物理的状況にふさわしい解は

$$\text{I}: \quad u_p(x)=C\{\exp(ikx)+R\exp(-ikx)\} \tag{2.4.3a}$$

$$\text{II}: \quad u_p(x)=CD\exp(-\bar{\kappa}x) \tag{2.4.3b}$$

である．ただし，$k=p/\hbar=\sqrt{2mE_p/\hbar^2}$．共通因子 C は‘ビーム強度式規格化’によって，$C=\sqrt{N_0/v}$ と決めておけばよい($v=\hbar k/m$)．R と D は $x=0$ における u_p と (du_p/dx) の連続条件 $1+R=D$ および $ik(1-R)=-\bar{\kappa}D$ から，次のように求められる：

$$R=\frac{k-i\bar{\kappa}}{k+i\bar{\kappa}}, \qquad D=\frac{2k}{k+i\bar{\kappa}}. \tag{2.4.4}$$

反射粒子流強度 $N^{(r)}$ および透過粒子流強度 $N^{(t)}$ は，それぞれ，$N^{(r)}=|J_p{}^{(r)}|=v|C|^2|R|^2=N_0$ および $N^{(t)}=J_p{}^{(t)}=0$ となるので，反射確率と透過確率に対して

$$P^{(r)}=1, \qquad P^{(t)}=0 \tag{2.4.5}$$

という結果が得られる．ここで $|R|=1$ となることに注意してほしい．さて，(2.4.5)は投入された粒子が 100% 反射され，ひとつも右方無限遠に流れつくものがないことを意味している．(2.4.3b)から見れば当然予想された結果であるといえよう．一見したところ，古典力学と同じ結果を与えたかのようであるが，領域IIでも粒子を見つける可能性がある点に，古典力学とは違う波動力学の特徴が存在する．ただし，古典的な波動光学における全反射現象と本質的に同じである．

領域Iの確率流密度が消えることは(2.4.5)から自明であるが，(2.4.4)と(2.4.3a)から直接計算して示すこともできる．なお，$C=(-i/2)(1-ik\bar{\kappa}^{-1})\bar{C}$ とおけば (2.4.3a)は

$$\text{I}: \quad u_p(x)=\bar{C}\left\{\sin kx-\frac{k}{\bar{\kappa}}\cos kx\right\}$$

となり，定数 $\bar{C}$ を除いて実数となるので，確率流密度が消えることは明らかであろう．

ここで $V_0\to\infty$ という極限をとってみよう．このとき $(k/\bar{\kappa})\to 0$ および領域II

で $\exp(-\bar{\kappa}x)\to 0$ となるので，固有関数は

$$\left.\begin{aligned} \mathrm{I}: \quad & u_p(x) = \bar{C}\sin kx \\ \mathrm{II}: \quad & u_p(x) = 0 \end{aligned}\right\} \tag{2.4.6}$$

となる．この場合，(2.4.4)は

$$R = -1, \qquad D = 0 \tag{2.4.7}$$

である．ただし，(2.4.5)はそのまま成立する．領域IIのいたるところで $u_p=0$ となり粒子を見つける可能性が全くなくなる点に V_0 が有限の場合との相違がある．このような無限大の高さをもったポテンシャルの壁を**剛体壁**(rigid wall)という．剛体壁をこえて粒子が進む可能性は，波動力学の場合といえども，全くない．

したがって，剛体壁は壁上および壁内の波動関数が消えるという境界条件によって数学的に表現される．ゆえに，剛体壁の位置(ここでは $x=0$) で波動関数自身は連続でも，その1階導関数は不連続になることに注意されたい．しかし，確率流密度はもちろん連続である．このような状況が起こりうることはすでに前節a)でふれておいたが，剛体壁付近はその好例を提供してくれたわけである．また，前節b)において，三角関数 $\sin(px/\hbar)$ を必要とする境界条件が出てくると予告したが，この場合が正にそれである．$\sin kx=(1/2i)\{\exp(ipx/\hbar)-\exp(-ipx/\hbar)\}$ と書けばわかるように，エネルギー固有関数(2.4.6)は右に進む運動量 p の波と左に進む運動量 $-p$ の波とを重ね合せた定在波状態になっている．右端を固定した弦の振動と同種の波である．

(ii) $E_p>V(x)$ の場合．領域Iは(i)の場合と全く同じであるが，領域IIの方程式は

$$\frac{d^2u_p}{dx^2}+\bar{k}^2u_p=0, \qquad \bar{k}=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_p\mp V_0)} \tag{2.4.8}$$

となる．V_0 の前の符号 $\mp$ は(2.4.1)の符号 $\pm$ に対応する．$\bar{k}$ はもちろん正の実数である．左方投入に適する解は

$$\mathrm{I}: \quad u_p(x) = C\{\exp(ikx)+R\exp(-ikx)\} \tag{2.4.9 a}$$

$$\mathrm{II}: \quad u_p(x) = CT\exp(i\bar{k}x) \tag{2.4.9 b}$$

であり，R と T は $x=0$ での連続条件 $1+R=T$ と $ik(-1-R)=i\bar{k}T$ から求められ，次のようになる：

$$R=\frac{k-\bar{k}}{k+\bar{k}},\qquad T=\frac{2k}{k+\bar{k}}. \tag{2.4.10}$$

粒子流強度はそれぞれ $N^{(\mathrm{r})}=|J_p{}^{(\mathrm{r})}|=v|C|^2|R|^2=N_0|R|^2$，$N^{(\mathrm{t})}=J_p{}^{(\mathrm{t})}=\bar{v}|C|^2|T|^2=N_0(\bar{v}/v)|T|^2$ であるから ($\bar{v}=\hbar\bar{k}/m$ は領域Ⅱにおける粒子速度)，直ちに反射確率と透過確率の式

$$P^{(\mathrm{r})}=\frac{(k-\bar{k})^2}{(k+\bar{k})^2},\qquad P^{(t)}=\frac{4k\bar{k}}{(k+\bar{k})^2} \tag{2.4.11}$$

が得られる．ポテンシャルが左右同水準でないため，$v\neq\bar{v}$ または $k\neq\bar{k}$，したがって，$P^{(\mathrm{t})}\neq|T|^2$ である点に注意してほしい．いまの場合，古典的粒子がポテンシャルによってはね返されることはないから，$P^{(\mathrm{r})}\neq 0$ という結果は純粋の量子力学的効果である．

階段ポテンシャルへの右方投入問題は明らかに

$$\text{I}:\quad u_p'(x)=C'T'\exp(-ikx) \tag{2.4.12 a}$$

$$\text{II}:\quad u_p'(x)=C'\{\exp(-i\bar{k}x)+R'\exp(i\bar{k}x)\} \tag{2.4.12 b}$$

という解をもつ．規格化は $C'=\sqrt{N_0/\bar{v}}$ であり，R' と T' は $x=0$ での連続条件から求まり

$$R'=\frac{\bar{k}-k}{\bar{k}+k},\qquad T'=\frac{2\bar{k}}{\bar{k}+k} \tag{2.4.13}$$

となる．左方投入解と右方投入解の関係は前節 c)の一般論から予想されるものと一致している．

b) 箱型ポテンシャル

図 2.8 の箱型ポテンシャルは単位階段関数 $\theta(x)$ を使って

$$V(x)=\mp V_0\left[\theta\left(x+\frac{a}{2}\right)-\theta\left(x-\frac{a}{2}\right)\right] \tag{2.4.14}$$

と表され，階段ポテンシャルの組合せとみることができる．ただし，$V_0>0$ とする．複号は − のとき引力型(図 2.8(a))，+ のとき斥力型(図 2.8(b))を表す．束縛状態は引力型の場合にのみ，特定のエネルギー ($E_\nu<0$) をもつ定常状態として実現されるはずである．散乱状態は両方の場合とも可能であり，連続的な正のエネルギー値 ($E_p>0$) に対して存在する．便宜上，$x<-a/2$ を領域Ⅰ，$|x|<a/2$ を領域Ⅱ，$x>a/2$ を領域 Ⅲ とよぼう．

(i) **束縛状態**　定常的 Schrödinger 方程式(*2.3.27*)は領域Ⅰと Ⅲ に対して

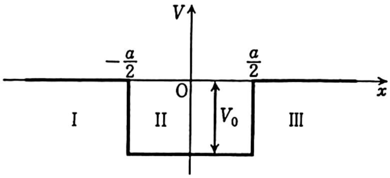
(2. 3. 29)，領域IIに対して(2. 4. 8)となるので，束縛状態の境界条件にしたがう解は

$$\text{I}:\quad u_\nu(x) = A\exp\left[\kappa_\nu\left(x+\frac{a}{2}\right)\right] \qquad (2.4.15\,a)$$

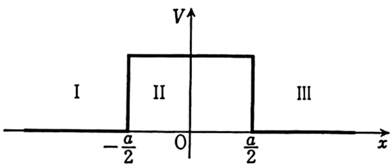
$$\text{II}:\quad u_\nu(x) = B_1\cos(\bar{k}_\nu x)+B_2\sin(\bar{k}_\nu x) \qquad (2.4.15\,b)$$

$$\text{III}:\quad u_\nu(x) = D\exp\left[-\kappa_\nu\left(x-\frac{a}{2}\right)\right] \qquad (2.4.15\,c)$$

である．ただし，$\kappa_\nu=\sqrt{2m|E_\nu|/\hbar^2}$，$\bar{k}_\nu=\sqrt{2m(V_0-|E_\nu|)/\hbar^2}$．さて，図のように座標原点をえらべば $V(-x)=V(x)$ となって空間反転対称性が成立し，エネルギー固有関数は一定のパリティをもつはずである．そこで，パリティによって固有関数を分類してみよう．



(a) 引力型



(b) 斥力型

図2.8　箱型ポテンシャル

パリティ ＋ の場合，$u_\nu^{(+)}(x)$ は偶関数でなければならないので，$D=A$ および $B_2=0$ となる．他の定数は $x=\pm(a/2)$ での連続条件

$$A-\beta B_1 = 0, \qquad \kappa_\nu A-\bar{k}_\nu\gamma B_1 = 0 \qquad (2.4.16)$$

から求められる．ただし，$\beta=\cos(\bar{k}_\nu a/2)$，$\gamma=\sin(\bar{k}_\nu a/2)$．(2. 4. 16) が $A=B_1=0$ 以外の解をもつ条件は

$$\bar{k}_\nu\gamma-\kappa_\nu\beta = 0 \qquad \text{または} \qquad \tan\xi = \xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2} \qquad (2.4.17)$$

であり，これがエネルギー E_ν を決定する方程式となる．ここで，$\xi=(\bar{k}_\nu a/2)=\sqrt{ma^2(V_0-|E_\nu|)/2\hbar^2}$，$w=\sqrt{ma^2V_0/2\hbar^2}$ とおいた．なお，$(\kappa_\nu a/2)=\sqrt{ma^2|E_\nu|/2\hbar^2}=$

$\sqrt{w^2-\xi^2}$．(2. 4. 17) は超越方程式であるから，数値解法によるか，図2.9のような図式解法に頼って解かなければならない．$\tan\xi$ と $\xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2}$ のグラフの交点(図2.9では黒点)が(2. 4. 17) の根を与える．図2.9の場合，$w=(7\pi/6)$ とえらんであるので，根は ξ_0 と ξ_1 の2個である．根 ξ_ν (ν は根の番号)に対応してエネルギー固有値

$$E_\nu=-\left[V_0-\frac{2\hbar^2\xi_\nu{}^2}{ma^2}\right] \qquad (2.4.18)$$

が得られる．w はポテンシャルの強さを表すパラメーターであるが，もしも $w<\pi$ ならば $\xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2}$ のグラフは $\xi=\pi$ の点より左に寄るので，根は1個しかない．その場合，パリティ ＋ のエネルギー固有状態はただ1個しかないわけである．w の値が π よりも増大すればパリティ ＋ の固有状態の数が増加し，$\pi<w<2\pi$ ならば2個，$2\pi<w<3\pi$ ならば3個，…，というように，w が π だけ増加するごとに新しい固有状態がひとつ生まれる．

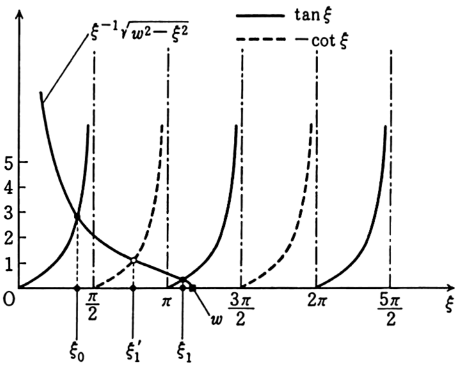


図2.9　$\tan\xi=\xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2}$ と $-\cot\xi=\xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2}$ の図式解法．この図では $w=(7\pi/6)$ とえらんである

さて，(2. 4. 16) は (2. 4. 17) に対応して $A=\beta B_1$ を与えるので，固有関数 $u_\nu{}^{(+)}(x)$ は B_1 を共通因子としてもつことになる．共通因子 B_1 を規格化条件 $(u_\nu{}^{(+)},u_\nu{}^{(+)})=1$，すなわち

$$|B_1|^2\left\{\beta^2\int_{-\infty}^{-a/2}\exp\left[2\kappa_\nu\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]dx+\int_{-a/2}^{a/2}\cos^2(\bar{k}_\nu x)\,dx\right.$$
$$\left.+\beta^2\int_{a/2}^{\infty}\exp\left[-2\kappa_\nu\left(x-\frac{a}{2}\right)\right]dx\right\}=1$$

によって決めれば，簡単な計算により

$$|B_1| = \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}} \qquad (2.4.19)$$

となる．そのさい，(2.4.17)を用いて整理した．こうして，規格化されたパリティ＋のエネルギー固有関数が得られたのである：

$$\text{I}:\quad u_\nu^{(+)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\cos\left(\frac{\bar{k}_\nu a}{2}\right)\exp\left[\kappa_\nu\left(x+\frac{a}{2}\right)\right] \qquad (2.4.20\,a)$$

$$\text{II}:\quad u_\nu^{(+)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\cos(\bar{k}_\nu x) \qquad (2.4.20\,b)$$

$$\text{III}:\quad u_\nu^{(+)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\cos\left(\frac{\bar{k}_\nu a}{2}\right)\exp\left[-\kappa_\nu\left(x-\frac{a}{2}\right)\right]. \qquad (2.4.20\,c)$$

パリティ－の場合，$u_\nu^{(-)}(x)$ は奇関数だから，$D=-A$ および $B_1=0$ である．パリティ＋の場合と同様にして，エネルギー E_ν を決める方程式

$$\bar{k}_\nu\beta+\kappa_\nu\gamma = 0 \qquad \text{または} \qquad -\cot\xi = \xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2} \qquad (2.4.21)$$

と $A=-\gamma B_2$ を得ることができる．超越方程式(2.4.21)を解くには，やはり図式解法が便利であろう．図2.9には $-\cot\xi$ のグラフが破線で描いてあるが，これと $\xi^{-1}\sqrt{w^2-\xi^2}$ との交点(図では白丸)が根 ξ_ν' を与える．根 ξ_ν' がわかれば，(2.4.18)と同形の式によりエネルギー固有値を求めることができる．パリティ＋の場合との著しい相違は，$w<(\pi/2)$ に対してパリティ－のエネルギー固有状態が存在しないことである．これはパリティ－の固有関数が奇関数であるという性質に関連している．奇関数は原点でゼロであるが，ゼロから出発して無限遠境界条件を満たすには，力の領域程度の距離 $(\cong a)$ の範囲に半波長程度の波が乗らなければならない．w はポテンシャルの強さを表すパラメーターであるが，同時に，ギリギリの束縛状態 $(E_\nu\cong 0)$ における波の数 $(w\cong\pi a/\lambda)$ を目安的に示すものでもある．したがって，$w>(\pi/2)$ はちょうど $a>(\lambda/2)$ となり，力の領域に波が半波長以上乗り束縛状態が実現するための条件になっている．w が $(\pi/2)$ を越えた後は，パリティ＋の場合と同じように，w が π だけ増加する毎に新しいパリティ－の固有状態が1個ずつ生まれる．パリティの正負を問わなければ，w の値が $(\pi/2)$ だけ増加するごとにエネルギー固有状態が1個ずつ出現するわけである．そのさい，パリティ＋状態とパリティ－状態は交互に生産されるが，その有様は図2.9か

ら明らかであろう．

パリティ－の場合の共通因子は $(A=-\gamma B_2$ のため$)\,B_2$ であるが，パリティ＋の場合と同様の手続により，これを規格化条件で決めれば，B_1 と同じ結果(2.4.19)が得られる．こうして得られたエネルギー固有関数は次のとおりである：

$$\text{I}:\quad u_\nu^{(-)}(x) = -\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\sin\left(\frac{\bar{k}_\nu a}{2}\right)\exp\left[\kappa_\nu\left(x+\frac{a}{2}\right)\right] \tag{2.4.22 a}$$

$$\text{II}:\quad u_\nu^{(-)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\sin(\bar{k}_\nu x) \tag{2.4.22 b}$$

$$\text{III}:\quad u_\nu^{(-)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\sin\left(\frac{\bar{k}_\nu a}{2}\right)\exp\left[-\kappa_\nu\left(x-\frac{a}{2}\right)\right] \tag{2.4.22 c}$$

パリティ－のエネルギー固有関数はすべて原点で消えるので，原点に剛体壁をおいたときの境界条件を自動的に満足している．したがって，図2.10のポテンシャルは(2.4.22)の右半分($x>0$ の部分)によって表されるような束縛状態をもつことになる．いうまでもないが，(2.4.20)は図2.10のポテンシャルの束縛状態ではない．3次元箱型ポテンシャルによる束縛状態(とくに角運動量ゼロの状態)はこのポテンシャルによる1次元束縛状態問題と等価になる．ゆえに，3次元箱型ポテンシャルの場合も $w<(\pi/2)$ のとき束縛状態は存在しない．

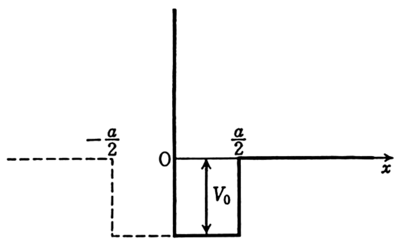


図2.10　原点に剛体壁をもつ箱型ポテンシャル

(ii)　散乱状態　まず，斥力型(図2.8(b))に対して $E_p=(p^2/2m)<V_0$ の場合を考えよう．p は初期運動量である．領域I, IIIでは(2.3.32)，領域IIでは(2.4.2)が成立するので，散乱状態境界条件(2.3.31)にしたがう解は

$$\text{I}:\quad u_p(x) = C\left\{\exp\left[ik\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]+R\exp\left[-ik\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]\right\} \tag{2.4.23 a}$$

$$\text{II}:\quad u_p(x) = C\{B_1\cosh(\bar{\kappa}x)+B_2\sinh(\bar{\kappa}x)\} \tag{2.4.23 b}$$

$$\text{III}:\quad u_p(x) = CT\exp\left[ik\left(x-\frac{a}{2}\right)\right] \tag{2.4.23 c}$$

となる†．ただし，$\bar{\kappa}=\sqrt{2m(V_0-E_p)/\hbar^2}$．共通因子 C はたとえば(2.3.19)で決めればよい．残りの定数を決める方程式は $x=\pm(a/2)$ における連続条件

$$R-\beta' B_1+\gamma' B_2=-1, \qquad -ikR+\bar{\kappa}\gamma' B_1-\bar{\kappa}\beta' B_2=-ik$$
$$\beta' B_1+\gamma' B_2-T=0, \qquad \bar{\kappa}\gamma' B_1+\bar{\kappa}\beta' B_2-ikT=0$$

である．ただし，$\beta'=\cosh(\bar{\kappa}a/2)$，$\gamma'=\sinh(\bar{\kappa}a/2)$．簡単な計算により次式が得られる：

$$\left.\begin{aligned} R&=-\frac{\beta'\gamma'(\bar{\kappa}^2+k^2)}{(\bar{\kappa}\gamma'-ik\beta')(\bar{\kappa}\beta'-ik\gamma')}, \qquad & T&=-\frac{ik\bar{\kappa}(\beta'^2-\gamma'^2)}{(\bar{\kappa}\gamma'-ik\beta')(\bar{\kappa}\beta'-ik\gamma')} \\ B_1&=-ik(\bar{\kappa}\gamma'-ik\beta')^{-1}, & B_2&=ik(\bar{\kappa}\beta'-ik\gamma')^{-1}. \end{aligned}\right\} \tag{2.4.24}$$

これから反射確率 $P^{(r)}=|R|^2$ と透過確率 $P^{(t)}=|T|^2$ に対して

$$P^{(r)}=\left[1+\frac{4E_p(V_0-E_p)}{V_0{}^2\sinh^2(\bar{\kappa}a)}\right]^{-1}, \qquad P^{(t)}=\left[1+\frac{V_0{}^2\sinh^2(\bar{\kappa}a)}{4E_p(V_0-E_p)}\right]^{-1} \tag{2.4.25}$$

が得られる．保存則 $P^{(r)}+P^{(t)}=1$ は明らかであろう．壁が十分高く，厚みも大きいときは，$(E_p/V_0)\ll 1$ および $\bar{\kappa}a\gg 1$ であるから，透過確率は極めて小さくなり

$$P^{(t)}\cong 16\left(\frac{E_p}{V_0}\right)\exp(-2\bar{\kappa}a) \tag{2.4.26}$$

のように近似することができる．$P^{(t)}\neq 0$ の存在が量子力学的なトンネル効果である．

次に，斥力型に対して $E_p>V_0$ および引力型に対して $E_p>0$ の場合を同時に考えよう．解は明らかに

$$\text{I}: \quad u_p(x)=C\left\{\exp\left[ik\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]+R\exp\left[-ik\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]\right\} \tag{2.4.27 a}$$

$$\text{II}: \quad u_p(x)=C\{B_1\cos(\bar{k}x)+B_2\sin(\bar{k}x)\} \tag{2.4.27 b}$$

$$\text{III}: \quad u_p(x)=CT\exp\left[ik\left(x-\frac{a}{2}\right)\right] \tag{2.4.27 c}$$

となる．ただし，$\bar{k}=\sqrt{2m(E_p\pm V_0)/\hbar^2}$；複号の ＋ は引力型，－ は斥力型の場合

---

† C を $C\exp(-ika/2)$ でおきかえれば，(2.4.23 a, c) は (2.3.31) と全く同じ形になる．ただし，(2.4.23 a, c) の R と T を $R\exp(ika)$ と $T\exp(ika)$ でおきかえておく必要がある．(2.3.31) と (2.4.23) との相違は，不定な位相因子をいかにえらぶかという問題にかかわるものであり，本質的なものではない．

である．$x=\pm(a/2)$ での連続条件から

$$\left.\begin{aligned} R &= \frac{-\beta\gamma(\bar{k}^2-k^2)}{(\bar{k}\gamma+ik\beta)(\bar{k}\beta-ik\gamma)}, \qquad & T &= \frac{ik\bar{k}(\beta^2+\gamma^2)}{(\bar{k}\gamma+ik\beta)(\bar{k}\beta-ik\gamma)} \\ B_1 &= ik(\bar{k}\gamma+ik\beta)^{-1}, & B_2 &= ik(\bar{k}\beta-ik\gamma)^{-1} \end{aligned}\right\} \quad (2.4.28)$$

が得られる．ただし，$\beta=\cos(\bar{k}a/2)$，$\gamma=\sin(\bar{k}a/2)$．ここで，$P_0=4k\bar{k}/(k+\bar{k})^2$ とおいて，R と T を

$$R = \pm i2P_0^{-1}\sqrt{1-P_0}\sin(\bar{k}a)\,T, \qquad T = P_0[1-(1-P_0)\exp(2i\bar{k}a)]^{-1} \quad (2.4.29)$$

のように書き直すと面白い．R の複号は引力型のとき $+$，斥力型のとき $-$ をとる．P_0 は階段ポテンシャル(図 2.7)への左方および右方投入問題に共通な透過確率に他ならない．ポテンシャルの形を見れば，R と T の式に階段ポテンシャルの透過確率が現れても不思議はなかろう．実際，階段ポテンシャルの解を組み合せて，箱型ポテンシャルの解をつくることができる．その方法は d) のところで，もっと一般の場合について，説明する予定である．

さて，反射確率 $P^{(r)}=|R|^2$ と透過確率 $P^{(t)}=|T|^2$ は

$$P^{(r)} = 4P_0^{-2}(1-P_0)\sin^2(\bar{k}a)|T|^2 = \left[1+\frac{4E_p(E_p\pm V_0)}{V_0^2\sin^2(\bar{k}a)}\right]^{-1} \quad (2.4.30\,a)$$

$$P^{(t)} = [1+4P_0^{-2}(1-P_0)\sin^2(\bar{k}a)]^{-1} = \left[1+\frac{V_0^2\sin^2(\bar{k}a)}{4E_p(E_p\pm V_0)}\right]^{-1} \quad (2.4.30\,b)$$

となる．複号は引力型に対して $+$，斥力型に対して $-$ をとる．確率保存則 $P^{(r)}+P^{(t)}=1$ は明らかであろう．

この場合では $P^{(r)}\neq 0$ の存在が量子力学的効果を表している．(2.4.29) または (2.4.30) を見れば，この効果は階段ポテンシャルによる反射確率 $(1-P_0)$ がゼロでないことに由来しており，本質的な波動現象として理解すべきものである．反射確率 $P^{(r)}$ は (V_0/E_p) が大きくなるにつれて増大するが，波動現象として見ればこれも当然予想される性質である．しかしながら，$\sin(\bar{k}a)=0$ を与える特定のエネルギーに対しては $P^{(r)}=0$ および $P^{(t)}=1$ が成立し，100% 透過が実現する．これは一種の共鳴散乱であり，$x=\pm(a/2)$ に存在する2個の壁によって反射を繰

り返す右向きの波と左向きの波の位相関係がちょうどうまく整合し，透過波を強め合い反射波を弱め合うとき起こる現象である．この現象も波動ということで理解されよう．くわしくはd)で議論する予定である．

共鳴散乱では，エネルギーが $\sin(\bar{k}a)=0$ を満足するときだけ無反射が実現した．この現象とは別に，すべての波数またはエネルギーに対して常に反射係数がゼロになるようなポテンシャルを求めよという問題がある．これを‘無反射問題’という．すなわち，束縛状態だけあって散乱状態の存在しないハミルトニアンを求める問題である．これは R と T の波数依存性またはエネルギー依存性を与えてポテンシャルを決めるという**逆散乱問題**(inverse scattering problem)の特別な場合になっている．1次元逆散乱問題はかなりくわしく解明されており，ある条件の下では，望みの散乱特性を与えるポテンシャルをつくることができる．とくに，1次元Schrödinger方程式の無反射問題の解であるポテンシャルはKorteweg-de Vries方程式の孤立波解によって与えられることがわかっている．Korteweg-de Vries方程式は浅い水路の波を記述する非線形偏微分方程式であった．逆散乱問題と非線形波動との関係は最近になって解明された事実であり，大そう興味深い．今後この分野の研究は急速に発展し，量子力学に対しても重要な貢献を与えると思う．本講座第1巻『古典物理学』第3章を参考にしていただきたい．

(iii) 散乱状態から束縛状態への解析接続 最後に，散乱状態固有関数と束縛状態固有関数の間に存在する興味深い数学的関係を指摘しておこう．散乱状態ではエネルギーは正実数であるが，束縛状態では特定の負実数値 E_ν をとる．そこで，引力型ポテンシャルの場合に，散乱問題のエネルギー E_p を任意の正実数値から負実数値 E_ν のところまで連続的に移動させて行ったとき，解析接続によって，関数(*2.4.27*)が関数(*2.4.20*)または(*2.4.22*)に移行するかどうかをしらべようというのである．散乱状態関数は一般に波数 $k=\sqrt{2mE_p/\hbar^2}$ の関数になっているので，E_p を正実数値から負実数値へ移動させようとすれば，k の分岐点 $E_p=0$ に遭遇する．解析接続を実行しようとすれば，E_p の複素数平面上でこの分岐点を迂回し $k=\pm i\kappa$ ($\kappa=\sqrt{2m|E_p|/\hbar^2}$) のいずれかの分岐に進入しなければならない．束縛状態関数に移行するには，境界条件を満足させるため，$k=i\kappa$ の分岐をえらぶ必要がある．そして，R と T の共通分母をゼロにする値にまで解析接続すればよい．このとき，共通因子 C を R と T の共通分母に比例するようにえ

らんでおけば，入射波が消滅して $CR\exp(\kappa x)$ $(x<-a/2)$ と $CT\exp(-\kappa x)$ $(x>a/2)$ だけが残り，望みの形になるというわけである．R と T の共通分母をゼロにする E_p の値 E_ν は(2.4.28)により方程式

$$[\bar{k}\gamma+i(i\kappa)\beta][\bar{k}\beta-i(i\kappa)\gamma]|_{E_p=E_\nu}=0$$

を満足することがわかるが，これは束縛状態のエネルギー固有値 E_ν を決定する方程式(2.4.17)と(2.4.21)の統合に他ならない．$[\bar{k}\gamma+i(i\kappa)\beta]=0$ の解はパリティ＋状態を，$[\bar{k}\beta-i(i\kappa)\gamma]=0$ の解はパリティ－状態を与えるはずである．パリティ＋の束縛状態に移行するため

$$C=-\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa a}{\kappa a+2}}\left(\frac{\gamma}{\kappa^2}\right)[\bar{k}\gamma+i(i\kappa)\beta][\bar{k}\beta-i(i\kappa)\gamma] \qquad (2.4.31\,a)$$

とえらび，$\bar{k}=\kappa(\beta/\gamma)$ を満足する値 $E_p=E_\nu$ を入れると

$$\left.\begin{aligned}&C=0, \quad CB_2=0, \quad CB_1=\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\\&CR=CT=\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\beta_\nu\end{aligned}\right\} \qquad (2.4.31\,b)$$

となり，(2.4.27)は完全に(2.4.20)に一致する．一方，パリティ－の束縛状態への移行は

$$C=\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa a}{\kappa a+2}}\left(\frac{\beta}{\kappa^2}\right)[\bar{k}\gamma+i(i\kappa)\beta][\bar{k}\beta-i(i\kappa)\gamma] \qquad (2.4.32\,a)$$

とえらべばよい．$\bar{k}=-\kappa(\gamma/\beta)$ を満足する $E_p=E_\nu$ では

$$\left.\begin{aligned}&C=0, \quad CB_1=0, \quad CB_2=\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\\&-CR=CT=\sqrt{\frac{2}{a}}\sqrt{\frac{\kappa_\nu a}{\kappa_\nu a+2}}\gamma_\nu\end{aligned}\right\} \qquad (2.4.32\,b)$$

となり，(2.4.27)は完全に(2.4.22)に一致する．

W. Heisenberg は束縛状態と散乱状態の間に存在するこの関係に注目し，物理的に必要なすべての知識が散乱問題の解の中に含まれていると考えて，Schrödinger 方程式に頼ることなく散乱問題の解である S 行列(1次元問題では R と T ――くわしくは散乱理論(本講座第4巻『量子力学II』第12章を見よ)を求める方式を確立するよう訴えた(1943年)．当時，場の量子論は発散の困難に悩まされていたが，彼はその原因が微分的な運動法則にあると推測し，理論体系から

Schrödinger 方程式を消去しようと意図したのである．彼のもくろみは，自然界には未発見の**普遍的な長さ**(universal length)が存在し，その程度以下の小さな時空領域の力学法則が現在知られている力学法則(すなわち，Schrödinger 方程式)と本質的に異っているはずだとする見通しに準拠している．Heisenberg の提案は一時多くの物理学者を S 行列の研究に駆り立てたが，本来の目的はまだ実現されていない．しかし，この人達の研究は散乱振幅の解析的性質を解明したり，分散理論を構成するなど素粒子物理学の発展に多くの寄与を与えたのである(『量子力学II』第12章散乱理論，第15章散乱振幅の解析的性質参照)．

c) δ関数ポテンシャルと剛体壁

箱型ポテンシャルの特殊な極限として δ 関数ポテンシャルと剛体壁を取り上げよう．

(i) δ関数ポテンシャル $V_0a=g$ を一定に保ちながら，$V_0\to\infty$ と $a\to 0$ の極限をとれば，箱型ポテンシャルは

$$V(x)=\pm g\delta(x) \qquad (g>0) \tag{2.4.33}$$

という δ 関数ポテンシャルに移行する．束縛状態は引力型の場合にのみ存在するが，$w=\sqrt{a}\sqrt{mg/2\hbar^2}\to 0$ であり $(\pi/2)$ より小さいから，パリティ＋状態がただ1個存在するだけである．その意味ではそれほど強い力ではない．さて，$\sqrt{w^2-\xi^2}=a\sqrt{m|E_0|/2\hbar^2}$，$\xi\to\sqrt{a}\sqrt{mg/2\hbar^2}$，$\tan\xi\to\xi$ を用いれば，直ちにエネルギー E_0 と固有関数 u_0 が求まる：

$$E_0=-\frac{mg^2}{2\hbar^2} \tag{2.4.34}$$

$$u_0(x)=\sqrt{\kappa_0}\exp(-\kappa_0|x|) \qquad (\kappa_0=mg/\hbar^2). \tag{2.4.35}$$

散乱状態については次のとおり．$\bar{\kappa}$ と $\bar{k}$ は同一極限 $2\sqrt{mg/2\hbar^2}/\sqrt{a}$ に，β と β' は同一極限1に，γ と γ' は同一極限に近づくので，次式が得られる：

$$R=\frac{-i(\pm mg/\hbar^2)}{k+i(\pm mg/\hbar^2)}, \qquad T=\frac{k}{k+i(\pm mg/\hbar^2)} \tag{2.4.36}$$

$$P^{(\mathrm{r})}=\frac{(mg/\hbar^2)^2}{k^2+(mg/\hbar^2)^2}, \qquad P^{(\mathrm{t})}=\frac{k^2}{k^2+(mg/\hbar^2)^2}. \tag{2.4.37}$$

ここで，複号は斥力型のとき＋，引力型のとき－をとる．$u_p(x)$ を求める作業は読者に委せよう．束縛状態でも散乱状態でも，固有関数は $x=0$ で連続である

が1階導関数は不連続である．しかし，確率流密度は連続である．

(ii) 剛体壁 引力型(図2.8(a))に対する束縛状態の議論において，$E_\nu+V_0$ を新しい E_ν でおきかえた後に極限 $V_0\to\infty$ をとってみよう．これはエネルギー原点をポテンシャルの底に移し，壁を剛体にする作業である．新しい E_ν は正の実数となる．このとき，$\xi=(\bar{k}_\nu a/2)=\sqrt{2mE_\nu/\hbar^2}$ は有限であるが，$\kappa_\nu=\sqrt{2m(V_0-E_\nu)/\hbar^2}$ と $\sqrt{w^2-\xi^2}=(\kappa_\nu a/2)$ は無限大に近づく．ゆえに，エネルギー E_ν を決める方程式 (2.4.17) と (2.4.21) は

$$\text{パリティ}\ +\qquad \cos(\bar{k}_\nu a/2)=0 \tag{2.4.38 a}$$

$$\text{パリティ}\ -\qquad \sin(\bar{k}_\nu a/2)=0 \tag{2.4.38 b}$$

または，まとめて

$$\sin(\bar{k}_\nu a)=0 \tag{2.4.39}$$

となるので，波数とエネルギー固有値は次のようになる：

$$\text{パリティ}\ +\qquad k_\nu=\frac{\pi}{a}(\nu+1)\qquad (\nu=0,2,4,\cdots) \tag{2.4.40 a}$$

$$\text{パリティ}\ -\qquad k_\nu=\frac{\pi}{a}(\nu+1)\qquad (\nu=1,3,5,\cdots) \tag{2.4.40 b}$$

$$E_\nu=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(\nu+1)^2\qquad (\nu=0,1,2,3,\cdots). \tag{2.4.41}$$

エネルギー固有関数は領域 I と III のいたるところで消えるが，領域 II では

$$\text{パリティ}\ +\qquad u_\nu{}^{(+)}(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left[\frac{\pi(\nu+1)x}{a}\right]\qquad (\nu=0,2,4,\cdots) \tag{2.4.42 a}$$

$$\text{パリティ}\ -\qquad u_\nu{}^{(-)}(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left[\frac{\pi(\nu+1)x}{a}\right]\qquad (\nu=1,3,5,\cdots) \tag{2.4.42 b}$$

または，まとめて

$$u_\nu(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left[\frac{\pi(\nu+1)}{a}\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]\qquad (\nu=0,1,2,3,\cdots) \tag{2.4.43}$$†

となる．この固有関数が剛体壁に囲まれた領域 $|x|<(a/2)$ における束縛状態を表

† この関数は，ν が奇数のとき $(-1)^{(\nu+1)/2}=\exp[i\pi(\nu+1)/2]$，$\nu$ が偶数のとき $(-1)^{\nu/2}=\exp[i\pi\nu/2]$ だけ (2.4.42) と違う．しかし，これらの因子は本来不定の位相因子に含められるはずだから，取り去っておいても差支えない．

すのであるが，両端を固定したピアノの弦の振動と同形の定在波状態であり，運動量 $[\hbar\pi(\nu+1)/a]$ および $-[\hbar\pi(\nu+1)/a]$ をもつ2個の運動量固有状態の‘重ね合せ’になっている．有限の領域に閉じ込められているため，運動量もエネルギーも離れ離れの値をとることになった．とくに，エネルギー最低の状態——これを**基底状態**(ground state)という——においてもゼロでないエネルギー(または運動量)をもつことに注意したい．最低エネルギーを**零点エネルギー**(zeropoint energy)ということがある．ゼロでない零点エネルギーの存在は，前節でふれた不確定性関係に根ざしている．いまの場合，波動関数が領域 $|x|<(a/2)$ 全体にひろがっているから，位置の不確定さは $\Delta x\sim a$ であろう．したがって，不確定性関係から $\Delta p\sim(h/a)$ 程度の運動量の不確定性が生じ，少なくとも $(\Delta p)^2/2m\sim(h^2/2ma^2)$ 程度のエネルギーをもつことが期待される．事実，基底状態 u_0 における運動量不確定性は $\Delta p=(\hbar\pi/a)-(-\hbar\pi/a)=(h/a)$ であり，また零点エネルギーは $E_0=(\hbar^2\pi^2/2ma^2)$ だから，その予想と大体一致する．不確定性関係を背景としてもつ零点振動は量子力学的束縛状態すべてに共通した特徴である．

(iii)　固有関数列の数学的性質　固有関数(*2.4.43*)がもっている数学的性質を——一般形を予見しながら——説明しておこう．私達は簡単に証明しうる公式

$$\int_{-a/2}^{a/2}\sin\left[\frac{\pi(\nu+1)}{a}\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]\sin\left[\frac{\pi(\nu'+1)}{a}\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]dx=\frac{a}{2}\delta_{\nu\nu'}$$

を知っている．ただし，Kronecker 記号 $\delta_{\nu\nu'}$ は $\nu=\nu'$ のとき1，$\nu\neq\nu'$ のとき0となるものである．この公式は固有関数(*2.4.43*)に対して

$$(u_\nu,u_{\nu'})=\delta_{\nu\nu'}\qquad(2.4.44)$$

を与える．括弧は関数内積である†．関数内積がゼロのとき，関与した2個の関数は互いに**直交**(orthogonal)するという．(*2.4.44*)は相異なる固有値 E_ν と $E_{\nu'}$ にぞくする固有関数 u_ν と $u_{\nu'}$ とが直交することを示している．一般に，Hermite 演算子の相異なる固有値にぞくする固有関数同士は互いに直交する．ハミルトニアンを例にとって証明しておこう．まず，$\hat{H}u_\nu=E_\nu u_\nu$，$\hat{H}u_{\nu'}=E_{\nu'}u_{\nu'}$ であるが，第1式の複素共役に $u_{\nu'}$ をかけて積分した式から第2式に $u_\nu{}^*$ をかけて積分した

† 関数内積をつくるときの積分範囲は $(-a/2, a/2)$ でよい．本来の範囲は $(-\infty,\infty)$ であるが，領域 $|x|>(a/2)$ では $u_\nu=0$ となるため，結果は同じである．しかし，この場所にかぎるならば，数学的議論を簡単にするために全領域を $(-a/2, a/2)$ に制限して話を進めてもよい．

式を引き算すれば，$\hat{H}$ の Hermite 性 $\hat{H}^{\dagger}=\hat{H}$ により

$$(E_\nu-E_{\nu'})(u_\nu, u_{\nu'}) = (u_\nu, \hat{H}^{\dagger}u_{\nu'})-(u_\nu, \hat{H}u_{\nu'}) = 0$$

が出てくる．ゆえに，$E_\nu \neq E_{\nu'}$ ならば $(u_\nu, u_{\nu'})=0$ でなければならない．固有値が縮退しているときは，もっと木目細い議論が必要であるが，後の議論に委せよう．

こうして(2. 4. 43)のつくる関数列 $\{u_\nu\}$ は**直交系**(orthogonal set)をつくることがわかった．規格化されていることを強調して**規格化直交系**または**正規直交系**(orthonormal set)ということがある．この関数列は，u_ν と同じ境界条件(剛体壁の場合は $|x|\geqq(a/2)$ でゼロという条件)にしたがう任意関数 $\psi(x)$ を次のような級数に展開できる能力をもっている：

$$\psi(x)=\sum_{\nu'=0}^{\infty}c_{\nu'}u_{\nu'}(x), \qquad c_\nu=(u_\nu, \psi). \tag{2. 4. 45}$$

係数を与える式は，級数展開式の両辺に $u_\nu{}^*$ をかけて積分し(2. 4. 44)を使えば，直ちに得られる．このように，任意関数を(2. 4. 45)型の級数に展開できるとき，関数列は**完全系**(complete set)をつくるという．(2. 4. 43)は**完全正規直交系**(complete orthonormal set)をつくるわけである．いま，(2. 4. 45)の展開式に $c_{\nu'}=(u_{\nu'}, \psi)$ を入れ，和と積分の順序を交換すれば

$$\psi(x)=\int\left\{\sum_{\nu'=0}^{\infty}u_{\nu'}(x)u_{\nu'}{}^*(x')\right\}\psi(x')\,dx'$$

となるが，これが任意の関数 ψ に対して成立するには

$$\sum_{\nu'=0}^{\infty}u_{\nu'}(x)u_{\nu'}{}^*(x')=\delta(x-x') \tag{2. 4. 46}$$

でなければならない．これが完全性条件である．直交性と完全性の物理的内容については第3章で議論しよう．

d)　共鳴散乱と準安定状態

ふたたび，透過確率(2. 4. 30 b)の議論にもどろう．すでに指摘したように，エネルギー E_p が

$$\sin(\bar{k}_n a)=0 \quad \text{または} \quad \bar{k}_n=\frac{\pi}{a}n \qquad (n=\text{正整数}) \tag{2. 4. 47}$$

を満足する値 $E_n=(\hbar^2\bar{k}_n{}^2/2m)\mp V_0$ に等しいときは $P^{(t)}=1$ と $P^{(r)}=0$ が成立する†．これは一種の**共鳴散乱**(resonance scattering)である．**透過共鳴**(transmis-

† 引力型の場合，$\bar{k}_n\geqq\sqrt{2mV_0/\hbar^2}$ だから n はかなり大きい．

sion resonance) ということもある．いま，E_p を横軸にとって(2. 4. 30 b)の与える $P^{(t)}$ のグラフを描くと，**共鳴準位**(resonance level) E_n のところで極大値 1 をもつピークが規則正しく現れる．ピークの様相は，引力型(図 2. 8(a))で $V_0 \gg E_p$ の場合にとくに著しく，極めて鋭い山を形成し共鳴点をはなれると急速に落ち込んでしまう．この場合に議論を集中しよう．ひとつのピーク E_n 付近に限定すれば，近似式 $\bar{k} \cong \bar{k}_n + (d\bar{k}/dE_p)_n (E_p - E_n)$ が成立する．添字 n は $E_p = E_n$ を表す．群速度公式 $(d\bar{k}/dE_p) = (\hbar\bar{v})^{-1}$ とポテンシャル領域を往復する時間 $\bar{\tau} = (2a/\bar{v})$ を代入すれば，この近似式は $\bar{k}a \cong \bar{k}_n a + (\bar{\tau}_n/2\hbar)(E_p - E_n)$ となる．これを(2. 4. 30 b)に入れ，P_0 と $(E_p - E_n)$ の高次項を無視すれば次式が得られる：

$$P^{(t)} \cong \left[1 + \left(\frac{E_p - E_n}{\Delta E_n}\right)^2\right]^{-1} \qquad (2.\,4.\,48)$$

ただし

$$\Delta E_n = \frac{\hbar P_0}{\bar{\tau}_n}. \qquad (2.\,4.\,49)$$

(2. 4. 48)は典型的な共鳴公式であり，ΔE_n の 2 倍を**半値幅**(half width)という．$V_0 \gg E_p$ に対しては $P_0 \cong 4(E_p/V_0)^{1/2} \ll 1$ であるから，ΔE_n はたしかに小さい．

共鳴散乱は**準安定状態**(metastable state)または**仮想状態**(virtual state)を経由して起こると考えることができる．波動としての粒子は，共鳴点に近いエネルギーをもつ場合，箱型ポテンシャル特有の鋭い両端の壁で多数回の反射を繰り返えし，ある程度長い時間ポテンシャルに束縛される状況が生まれるであろう．このような一種の束縛状態を準安定状態または仮想状態という．そのエネルギー準位すなわち共鳴準位が(2. 4. 47)によって与えられる．これは無限に深いポテンシャルによる束縛状態のエネルギーを決める式(2. 4. 39)と同形である．しかし，本来の束縛状態と違って，準安定状態または仮想状態は永久に存続するわけではなく，粒子がポテンシャル領域に滞在する時間，つまり，準安定状態の寿命は有限である．(2. 3. 17)についての議論を想い起こせば，有限の寿命 Δt をもつ状態は $\Delta E \sim (\hbar/\Delta t)$ 程度の幅だけエネルギーが不確定になっていることが予想される．透過確率のエネルギー依存性として観測される共鳴ピークの幅 ΔE_n は，正に，この意味でのエネルギー不確定性を与えてくれるものである．ゆえに，準安定状態の寿命は(2. 4. 49)に対応して

$$(\Delta t)_n \sim (\hbar/\Delta E_n) \sim (\bar{\tau}_n/P_0) \qquad (2.4.50)$$

の程度であろう．この式は次のような定性的な推論によって理解することもできる：階段ポテンシャルの壁を越えて進む確率が P_0 であるから，平均 $(1/P_0)$ 回衝突してはじめて透過できる．また，ポテンシャル領域を往復する時間 $\bar{\tau}_n$ ごとに1回衝突するわけであるから，透過に要する時間(つまり，寿命)は $(\bar{\tau}_n/P_0)$ の程度になるはずである．これはちょうど(2.4.50)に等しい．このように，(2.4.48)および(2.4.49)は透過共鳴が準安定状態を経由して起こることを暗示している．しかしながら現在の問題は，無限に長い時間つづくエネルギー確定の波による定常状態としての散乱現象であり，決して準安定状態の時間的崩壊過程を扱っているわけではない．時間的過程として準安定状態の崩壊を扱い，有限寿命(2.4.50)の存在を直接確認するには，ある程度短い波束による散乱現象を観測する必要がある．波束の通過時間に比べて寿命が十分長いときだけ，崩壊過程が直接見られるのである．逆の場合はそうはゆかない．ただ，透過確率のエネルギー依存性の共鳴ピークを通して準安定状態の存在を知るだけである．波束の散乱については本講座第4巻『量子力学II』第12, 13章散乱理論を見ていただきたい．

さて，いま議論した透過共鳴および準安定状態の存在は，両端に鋭い壁をもつという箱型ポテンシャルの特性に負うところが大きい．しかし，この特性自身は決して机上の産物ではなく，本質においてよく似た現象が現実に観測されている．たとえば，電子と原子の低エネルギー衝突において，電子がほとんど散乱されないまま透過してしまう現象——Ramsauer-Townsend 効果があるが，これは透過共鳴の一種である．また，中性子と陽子の1重項散乱には有名な仮想状態が現れる．この種の現象を模型的に簡単化した表現が箱型ポテンシャルであると考えてよい．しかし，通常これらの現象に模型として登場する箱型ポテンシャルはあまり長い寿命を与えない．この場合，準安定状態というよりも仮想状態という用語の方が適切であろう．準安定状態という用語は，原子, 原子核, 素粒子などの衝突現象において豊富に観測されている鋭いピークをもつ共鳴準位によりふさわしい．この種の共鳴散乱が生ずる機構を1次元ポテンシャルによって模型的に簡単化して表現すれば，図2.11のようになるであろう．話を簡単にするため，$V(-x)=V(x)$ としてある．両側にそびえる山の高さおよび中央の谷の深さはエネルギー E_p に比べて十分大きいとしておこう．中央の谷を箱型にしてあるが，これも話

を簡単にするためであり他意はない．左方から投入された粒子はトンネル効果によって2つの山を抜けて右方に進出できるわけであるが，一般に，山の高さや幅が大きくなるほど透過確率は小さくなってゆく．それにもかかわらず，箱型ポテンシャルの場合に見られたような位相の整合が実現して，共鳴散乱が起こるかどうかしらべようというのである．

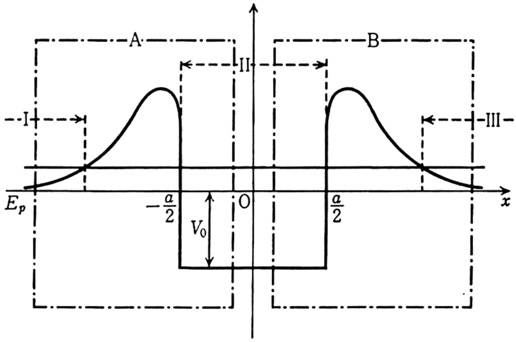


図 2.11 共鳴散乱と準安定状態

図 2.11 を見ながら話を進める．まず，部分 A だけあって部分 B のないポテンシャル V_A の左右投入問題が解けていたとしよう．すなわち，左方投入に対する反射係数 R_1 と透過係数 T_1 および右方投入に対する反射係数 R_2 と透過係数 T_2 が与えられたとしよう．$\lim_{x\to-\infty} V_A=0$ および $\lim_{x\to\infty} V_A=-V_0$ であるから，$V_1=0$，$V_2=-V_0$，$\hbar^{-1}p_1=k$，$\hbar^{-1}p_2=\bar{k}$ とおけば，前節の定理 (2.3.38) ~ (2.3.41) が成立する．一方，部分 B だけのポテンシャル V_B への左方投入問題の解は，V_A に対する右方投入解の空間反転 $(x\to-x)$ に等しいので，やはり反射係数 R_2 と透過係数 T_2 をもつであろう．これらを組み合せて，全体のポテンシャル V に対する左方投入問題を解き，反射係数 R と透過係数 T を求めようとするのが現在の問題である．さて，領域 I の波は V_A に対する左方投入解と右方投入解の‘重ね合せ’であるから

$$\mathrm{I}:\quad u_p(x) \xrightarrow[x\to-\infty]{} C_1\left\{\exp[ik(x+\alpha)]+\left(R_1+\frac{C_2}{C_1}T_2\right)\exp[-ik(x+\alpha)]\right\} \tag{2.4.51 a}$$

とおいてよい．C_1 および C_2 はそれぞれ左方および右方投入解の振幅であり，α

は適当にえらばれた位相定数である†. これに対する領域IIの波は

$$\text{II}:\quad u_p(x) = C_1\left\{\left(T_1+\frac{C_2}{C_1}R_2\right)\exp\left[i\bar{k}\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]+\frac{C_2}{C_1}\exp\left[-i\bar{k}\left(x+\frac{a}{2}\right)\right]\right\}$$
$$= C_1\left(T_1+\frac{C_2}{C_1}R_2\right)\exp(i\bar{k}a)\left\{\exp\left[i\bar{k}\left(x-\frac{a}{2}\right)\right]\right.$$
$$\left.+\frac{C_2}{C_1}\left(T_1+\frac{C_2}{C_1}R_2\right)^{-1}\exp(-2i\bar{k}a)\exp\left[-i\bar{k}\left(x-\frac{a}{2}\right)\right]\right\}$$
$$(2.4.51\,b)$$

となる. 第2式を V_{B} に対する左方投入解と見なすためには

$$R_2 = \frac{C_2}{C_1}\left(T_1+\frac{C_2}{C_1}R_2\right)^{-1}\exp(-2i\bar{k}a) \qquad (2.4.52)$$

を要求する必要がある. この条件の下では, (2.4.51 b)第2式に対応する領域IIIの波は

$$\text{III}:\quad u_p(x) \xrightarrow[x\to\infty]{} C_1\left(T_1+\frac{C_2}{C_1}R_2\right)\exp(i\bar{k}a)\,T_2\exp[ik(x-\alpha)]$$
$$(2.4.51\,c)$$

となり, 右方進行波しか存在しない. これで全体のポテンシャル V に対する左方投入問題の境界条件

$$\left.\begin{aligned}\text{I}:&\quad u_p(x) \xrightarrow[x\to-\infty]{} C_1\{\exp[ik(x+\alpha)]+R\exp[-ik(x+\alpha)]\}\\ \text{III}:&\quad u_p(x) \xrightarrow[x\to\infty]{} C_1 T\exp[ik(x-\alpha)]\end{aligned}\right\}$$
$$(2.4.53)^{\dagger\dagger}$$

を満足させることができたのである. (2.4.51 a, c)を(2.4.53)と比較すれば直ちに

$$T = \left(T_1+\frac{C_2}{C_1}R_2\right)T_2\exp(i\bar{k}a), \qquad R = R_1+\frac{C_2}{C_1}T_2 \qquad (2.4.54)$$

が得られる. (2.4.52)は (C_2/C_1) を決定する方程式であるが, これを解いて (C_2/C_1) を求め(2.4.54)に代入すれば

† 位相定数 α のえらび方の如何にかかわらず, 定理(2.3.38)～(2.3.41)は全く同じ形で成立する.

†† (2.4.53)と(2.3.31)では入射波の位相のえらび方に見掛け上の相違がある. (2.4.53)において $C_1=C\exp(-ik\alpha)$ とおけば(2.3.31)となるが, その場合, (2.4.53)の $R\exp(-2ik\alpha)$ をもって(2.3.31)の R としなければならない. T についても同様である.

$$T=\frac{T_1T_2\exp(i\bar{k}a)}{1-R_2{}^2\exp(2i\bar{k}a)} \tag{2.4.55 a}$$

$$R=\frac{R_1+R_2(T_1T_2-R_1R_2)\exp(2i\bar{k}a)}{1-R_2{}^2\exp(2i\bar{k}a)} \tag{2.4.55 b}$$

となる．これが求める解である†．試みに箱型(図2.8(a))に適用してみよう．その場合 V_A は図2.7(b)の階段ポテンシャルであるから，$P_0=T_1T_2=4k\bar{k}/(k+\bar{k})^2$，$R_2=-R_1=\sqrt{1-P_0}$ となり，(2.4.55)は直ちに(2.4.29)を与える．

一般の場合にもどろう．ポテンシャル V_A の透過確率を P_A と書けば，(2.3.38)により $P_A{}^2=|T_1|^2|T_2|^2$ および $|R_2|^2=1-P_A$ が成立するので，全体の透過確率 $P^{(t)}=|T|^2$ は

$$P^{(t)}=[1+4P_A{}^{-2}(1-P_A)\sin^2(\bar{k}a+\arg R_2)]^{-1} \tag{2.4.56}$$

となる．ゆえに，エネルギー E_p が

$$\sin(\bar{k}a+\arg R_2)=0 \tag{2.4.57}$$

を満足する値 E_n 付近にあれば，たしかに透過共鳴が実現する．

ポテンシャルの山が十分高ければ，V_A への右方投入は剛体壁との衝突に似てくるから，R_2 は -1 に近づき $\arg R_2$ を無視できるようになるだろう((2.4.7)参照)．このとき，(2.4.57)は箱型の場合の式(2.4.47)に一致し，共鳴ピーク付近では $P^{(t)}$ は共鳴公式(2.4.48)によって表される．ただし，(2.4.49)の P_0 は P_A によっておきかえなければならない．山が高ければ P_A は極めて小さく，非常に鋭いピークが現れる．これは準安定状態が非常に長い寿命をもつことを意味している．古典的には，領域IIの粒子が外へ出てくるはずはない．すなわち，古典的には無限大のはずの滞在時間を量子力学的トンネル効果が有限値に引き下げたのである．一方，箱型の場合は，古典的には極めて短い滞在時間(単なる通過時間)を量子力学的反射効果がかなり長く引き延したわけである．見掛け上同じ共鳴現象も内容的にはこのように違う．

準安定状態を共鳴散乱の中間過程として扱ったが，束縛状態のように，単独のエネルギー固有値問題(固有値 E_ν，固有関数 u_ν)として定式化することもできる．その場合，物理的状況を反映させるためには，準安定状態の境界条件は

$$u_\nu(x)\xrightarrow[|x|\to\infty]{}(\text{定数})\exp[ik|x|] \tag{2.4.58}$$

† 保存則 $|R|^2+|T|^2=1$ の証明は容易である．それには一般的な関係式(2.3.41)を用いるとよい．

でなければならない．これは準安定状態の崩壊が粒子を左右無限遠に送る事実を定式化したものである．この境界条件の下では，ハミルトニアン $\hat{H}=-(\hbar^2/2m)\cdot(d^2/dx^2)+V(x)$ は Hermite 性を失い，固有値 E_ν は複素数となる．(p. 69 の脚注を参考にしながら，読者自らこの事情を確認してほしい.) (*2. 4. 51*) の場合，$C_1=0$ とおけば，正に，この境界条件が実現する．ただし，このとき条件式(*2. 4. 52*)は

$$R_2{}^2\exp(2i\bar{k}a)=1 \qquad (2.4.59)$$

となるが，これが固有値 E_ν を決める方程式である！ (*2. 4. 59*) は一般的には複素根をもつ．山が十分高く $\arg R_2$ を無視できるとき，近似的に (*2. 4. 59*) を解けば

$$E_\nu\cong\frac{\hbar^2\pi^2(\nu+1)^2}{2ma^2}-V_0-i\frac{\hbar P_{\rm A}}{\bar{\tau}_\nu} \qquad (2.4.60)^\dagger$$

が得られる．ただし，$\bar{\tau}_\nu=(2a/\bar{v}_\nu)=[2a^2m/\hbar\pi(\nu+1)]$．なお，$\nu$ は ${\rm Re}\,E_\nu\geqq0$ となるような正整数である．(*2. 4. 60*) を剛体壁による束縛状態のエネルギー準位 (*2. 4. 41*) と比較すれば興味深い．$-V_0$ はエネルギー原点の相違による差であるが，虚部は準安定状態が有限の寿命をもつことと密接に関係している．いま，エネルギー固有状態の時間因子 $\exp(-iE_\nu t/\hbar)$ に (*2. 4. 60*) を代入すれば，

$$|\exp(-iE_\nu t/\hbar)|=\exp[-(P_{\rm A}/\bar{\tau}_\nu)t]$$

となるので，この状態が $(\Delta t)_\nu\sim(\bar{\tau}_\nu/P_{\rm A})$ 程度しか生きていないことがわかるであろう．これは正に (*2. 4. 50*) のところで推測していた事柄である．

——議論を簡単にするため領域IIを箱型としたが，谷の形を一般化しても，左向きと右向きの波が区別でき反射・透過係数が定義できるならば，話はかわらない．この状況は谷の部分に多くの波数が含まれるとき明瞭な形で実現される．その場合，古典近似(WKB 法)が適用でき議論は箱型の場合とほとんど同じ形で進行する．ここで古典近似にふれている余裕はないので結論だけを記せば，箱型の場合の $2\bar{k}a$ を $\hbar^{-1}\oint\sqrt{2m(E_p-V(x))}\,dx$ でおきかえればよい(積分は内部回帰点間を往復する軌道について行う)．ゆえに共鳴準位を決める式は古典量子論における量子条件と同形になる．

† ${\rm Re}\,E_\nu$ にも $\arg R_2$ に比例する小さな補正項が付加され，共鳴準位のずれを与える．しかし，寿命に関する議論には直接関係ないので省略した．

e) 調和振動子 I

最後に調和振動子の問題を取り上げよう．質量 m，角振動数 ω をもつ調和振動子のハミルトニアンは

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2q^2 \tag{2.4.61}$$

である．q は力の中心からの距離，p は q に正準共役な運動量を表す．このポテンシャルは中心を離れるにつれて無限に増大するので，束縛状態しか存在しない．調和振動子問題を後まわしにしたのはこの特殊性のためであるが，本来，量子論は調和振動子エネルギーの量子性からはじまったのであるから，波動力学発足直後にこの問題を扱って Planck 仮説を‘結果’として提示し，波動力学が古典量子論の成果を正しく受け継いでいることを確認すべきだったのかもしれない．なお，q が現実の空間における距離を表すとき，調和振動子ポテンシャルは安定平衡点付近の小振動に対する近似として現れるものであり†，決して無限遠までそのままの形で使用されることはない．また，ハミルトニアン(2.4.61)を用いる場合，エネルギー原点はポテンシャルの底におかれているので，束縛状態ではあってもエネルギーは正の値をとる．この点，剛体壁に囲まれた領域の束縛状態問題((2.4.41)を見よ)と同じ事情にある．

さて，ハミルトニアン(2.4.61)に対応する定常的Schrödinger方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_\nu(q)}{dq^2}+\frac{1}{2}m\omega^2q^2u_\nu(q)=E_\nu u_\nu(q) \tag{2.4.62}$$

である．無限遠でゼロとなるポテンシャルの場合(2.3.29)と違って，$|q|\to\infty$ に対する(2.4.62)の漸近形は

$$\frac{d^2u_\nu}{dq^2}-\left(\frac{m\omega}{\hbar}q\right)^2u_\nu=0$$

となるので，u_ν は漸近的に $q^n\exp[\pm(m\omega/2\hbar)q^2]$ に近づくはずである(n は定数)．複号のうち，束縛状態境界条件に適合するものは明らかに $-$ だけである．そこで

† ポテンシャル $V(x)$ が安定平衡点 x_0 をもつとき，$V'(x_0)=0$ および $V''(x_0)>0$ が成り立つ．ゆえに，x_0 付近の小振動に対して $V(x)\cong V(x_0)+(1/2)V''(x_0)(x-x_0)^2$ という近似を用いることができる．そこで $V''(x_0)=m\omega^2$ および $x-x_0=q$ とおき，$H-V(x_0)$ を改めて H と書けばハミルトニアン $H=(p^2/2m)+V(x)$ は(2.4.61)となる．

$$u_\nu(q) = C_\nu H_\nu(\xi) \exp\left[-\frac{1}{2}\xi^2\right] \qquad (2.4.63)$$

とおくことにしよう．ただし，無次元変数 $\xi=(m\omega/\hbar)^{1/2}q$ を用いた．漸近形から考えれば，$H_\nu(\xi)$ は多項式になることが予想されている．(2.4.63)を(2.4.62)に入れ，

$$\epsilon_\nu = \frac{2E_\nu}{\hbar\omega} \qquad (2.4.64)$$

とおいて，$H_\nu(\xi)$ の方程式を求めれば

$$\frac{d^2H_\nu}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_\nu}{d\xi} + (\epsilon_\nu - 1)H_\nu = 0 \qquad (2.4.65)$$

が得られる．この方程式を解いて $H_\nu(\xi)$ が多項式になるように ϵ_ν，すなわち，E_ν を決定すればよい．さて，$\xi=0$ は方程式の特異点でないので，解は $\xi=0$ のまわりで正則であり ξ のベキ級数として表すことができる．ここで，空間反転不変性を想い出そう．調和振動子ポテンシャルは q の偶関数であるから，エネルギー固有関数 u_ν は一定のパリティをもつはずである．(2.4.63)によれば，パリティ ± はそのまま関数 $H_\nu(\xi)$ の偶奇性に反映しなければならない．こうして，

パリティ ＋　　$H_\nu(\xi) = a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + \cdots$

パリティ －　　$H_\nu(\xi) = a_1\xi + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \cdots$

とおいてよいことがわかる．この級数を(2.4.65)の左辺に代入して ξ の各次数ごとの係数をゼロとおけば，パリティ ± 双方の場合に成立する漸化式

$$(j+2)(j+1)a_{j+2} = (2j+1-\epsilon_\nu)a_j \qquad (2.4.66)$$

が出てくる．ゆえに，a_0 を与えれば順次 $a_2, a_4, \cdots$ が決まり，a_1 を与えれば a_3, $a_5, \cdots$ が求められる．解に含まれる任意定数は a_0 と a_1 の2個であるが，これは(2.4.65)が2階の常微分方程式であることを考えれば当然であろう．さて，ϵ_ν に勝手な値を許しておいては，$H_\nu(\xi)$ は無限級数のままでおり決して多項式にはならない．まず，この無限級数の漸近形を求めてみよう．上記の漸化式は $j\to\infty$ に対して $(a_{j+2}/a_j)\to(2/j)$ を与えるが，これは $|\xi|\to\infty$ に対する $H_\nu(\xi)$ の漸近形が $\xi^n \exp[+\xi^2]$ (n は定数)になることを意味している†．この漸近形を(2.4.63)に入れて見れば直ちにわかるように，これでは，束縛状態に対する境界条件を満足

† $\xi^n \exp[\xi^2]$ をベキ級数展開し，隣同士の係数の比をとって比較すれば容易にたしかめられる．

することができない．$u_\nu(q)$ が束縛状態境界条件を満たすためには，どうしても $H_\nu(\xi)$ が多項式になる必要がある．特定の正整数 ν を越えるすべての番号 j に対して係数 a_j がゼロであれば，すなわち，$a_j=0$ $(j\geqq\nu+2)$ であれば，$H_\nu(\xi)$ は ν 次の多項式になる．漸化式 (2.4.66) によれば，これは ϵ_ν（したがって，E_ν）が特定の値

$$\epsilon_\nu = 2\nu+1 \qquad \text{または} \qquad E_\nu = \hbar\omega\left(\nu+\frac{1}{2}\right) \tag{2.4.67}$$

をとるときだけ実現される．ただし，$\nu=0,1,2,\cdots$．これは正に調和振動子エネルギーに対する Planck 仮説そのものである．このようにして，波動力学は‘結果’として Planck の公式を与えることになった．

——零点エネルギー $E_0=\hbar\omega/2$ は元の Planck 仮説にはなかったものである．剛体壁による束縛状態の場合にも述べたように，零点エネルギーの存在は粒子の波動性（同じことであるが，波動性にもとづく不確定性関係 $\Delta q\Delta p\sim\hbar$）と密接に結びついている．もしも，$E_0=0$ であったとすれば，粒子は $p=0$ および $q=0$ という運動状態にあることになり，波動性または不確定性関係に矛盾する．後でもう一度議論しよう．

さて，(2.4.67) に対して (2.4.65) は

$$\frac{d^2H_\nu}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH_\nu}{d\xi}+2\nu H_\nu = 0 \tag{2.4.68}$$

となるが，これは Hermite の微分方程式として知られている．解は (2.4.66) と (2.4.67) を用いて求めることができるが，習慣上

$$H_\nu(\xi) = (-1)^\nu \exp(\xi^2)\frac{d^\nu}{d\xi^\nu}\exp(-\xi^2) \tag{2.4.69}$$

によって定義される Hermite 多項式を使用する人が多い．(2.4.69) の右辺が ν 次の多項式を与えることは明らかであろう．右辺の微分を丹念に実行してゆけば係数 a_j の具体形が得られるが，もちろん，それは漸化式 (2.4.66) の解になっている．(2.4.69) では最高次 ξ^ν の係数は 2^ν であるが，こうなるように a_0 または a_1 を決めたわけである．くわしい計算は読者に委せよう．$\nu=0,1,2,3$ に対する Hermite 多項式の具体形は次のとおり：

$$H_0(\xi) = 1, \qquad H_1(\xi) = 2\xi, \qquad H_2(\xi) = 4\xi^2-2, \qquad H_3(\xi) = 8\xi^3-12\xi.$$

最後の仕事は定数 C_ν を規格化条件によって決めることであるが，それには公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_\nu(\xi) H_{\nu'}(\xi) \exp(-\xi^2) d\xi = 2^\nu \nu! \sqrt{\pi}\, \delta_{\nu\nu'} \qquad (2.4.70)^{\dagger}$$

を用いればよい．$\xi = (m\omega/\hbar)^{1/2} q$ に注意すれば，直ちに

$$|C_\nu| = \sqrt{\frac{1}{2^\nu \nu!}} \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \qquad (2.4.71)$$

が得られる．このようにして——(2.4.69) と (2.4.71) を (2.4.63) に代入して——調和振動子のエネルギー固有関数が求められた．なお，関数列 $\{u_\nu(q)\}$ が直交性をもつことは (2.4.70) から明らかであろう．したがって，$(u_\nu, u_{\nu'}) = \delta_{\nu\nu'}$ が成立する．

さて，基底状態固有関数は

$$u_0(q) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar} q^2\right] \qquad (2.4.72\,a)$$

であるが，u_0 の与える存在確率密度 $|u_0(q)|^2$ は標準偏差 $\Delta q = (\hbar/2m\omega)^{1/2}$ をもつ Gauss 分布となる．いうまでもなく，これは原点を中心に Δq 程度のひろがりをもつ零点振動を記述している．一方，運動量についての知識は状態関数

$$a_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} u_0(q) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} pq\right] dq$$

$$= (\hbar\pi m\omega)^{-1/4} \exp[-(p^2/2\hbar m\omega)] \qquad (2.4.72\,b)$$

が与えてくれるが，確率分布 $|a_0(p)|^2$ はやはり Gauss 型となり，$p=0$ を中心に左右対称の形で標準偏差 $\Delta p = (\hbar m\omega/2)^{1/2}$ の程度ひろがっている．位置と運動量の不確定度の目安となる標準偏差 Δq と Δp は不確定性関係

$$\Delta q \Delta p = \frac{\hbar}{2} \qquad (2.4.73)$$

---

† 証明：$\nu \neq \nu'$ の場合，一般性を害することなく $\nu > \nu'$ としてよい．($\nu < \nu'$ ならば ν と ν' の役割を交換せよ．) このとき $H_\nu(\xi)$ に対して (2.4.69) を用い，μ 回部分積分を繰り返せば (2.4.70) の左辺は

$$(-1)^{\mu+\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^\mu H_{\nu'}(\xi)}{d\xi^\mu} \frac{d^{\nu-\mu}}{d\xi^{\nu-\mu}} \exp(-\xi^2) d\xi$$

となる(ただし，$\nu > \mu$)．ここで $\mu > \nu'$ とすれば，$H_{\nu'}$ は ν' 次の多項式であるから $(d^\mu H_{\nu'}/d\xi^\mu) = 0$ となり，当然積分値もゼロとなる．$\nu = \nu'$ の場合，$\mu = \nu$ とおけば $(d^\nu H_\nu/d\xi^\nu) = 2^\nu \nu!$ であるから，積分は $2^\nu \nu! \sqrt{\pi}$ に等しい．なぜならば，ξ^ν の係数は 2^ν であり，また $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2) d\xi = \sqrt{\pi}$ だからである．証明終り．

を満足している．この関係については第3章でくわしく議論しよう．位置と運動量がある程度の不確定さをもつとすれば，基底状態のエネルギーもゼロではありえない．Δq と Δp に対応して，少なくとも $(1/2m)(\Delta p)^2+(1/2)m\omega^2(\Delta q)^2$ 程度の値をもつはずである．$\Delta q=(\hbar/2m\omega)^{1/2}$ および $\Delta p=(\hbar m\omega/2)^{1/2}$ を代入すれば，これはちょうど(*2.4.67*)の与える零点エネルギー $E_0=\hbar\omega/2$ に等しい．

調和振動子のエネルギー固有関数は，しばしば，強く束縛された状態を近似するのに用いられるが，調和振動子自身が安定平衡点付近の小振動に対する近似であるから，当然予想されるところである．一方，第1章で説明したように，電磁波は無数の調和振動子の集団に等価であり，電磁波または輻射場の量子論は調和振動子の量子力学的取り扱いを通して構成される．その場合，(*2.4.67*)における量子数 ν は光量子の個数を表すものとなり，輻射場エネルギーの量子性は光の粒子性の直接的根拠を与えた．調和振動子問題と切り離して場の量子論の議論をすることはできない(第10章を見よ)．第3章でもう一度調和振動子問題を取り上げる．

第3章　量子力学の形成

第2章では波動力学の運動法則を設定し，それを定常状態問題に適用しながら波動力学の具体的内容を研究してきたわけであるが，その経験を織り込んで量子力学理論体系の建設を進めよう．

§3.1　運動量表示

私達がえらんだ量子力学への導入路は波動力学であった．波動力学の主役は時空点 $(\boldsymbol{r},t)$ の関数として書き表した波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ である．定常状態の議論を見てもわかるように，この表現方法は波動という直観的描像に助けられて広く用いられている．しかし理論体系として見れば，時空表示の波動関数だけでは不自由または不満足を感じる場合が少なくない．私達の波動力学においても第3法則の設定にさいして波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ の Fourier 変換 $A(\boldsymbol{p},t)$ を導入せざるを得なかったわけである．第3法則は $|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ によって存在確率密度を与え，$|A(\boldsymbol{p},t)|^2$ を通して運動量確率分布を見ようとする規定であった．すなわち，波動力学は，出発点において時空表示の波動関数ばかりでなく，その Fourier 変換を必要としていたのである．しかし，いうまでもなく，$\psi(\boldsymbol{r},t)$ と $A(\boldsymbol{p},t)$ とは独立ではなく，Fourier 変換(*2.2.6*)および(*2.2.7*)によって互いに結びつけられている．$\psi(\boldsymbol{r},t)$ を与えれば $A(\boldsymbol{p},t)$ が決まるし，逆に $A(\boldsymbol{p},t)$ を与えて $\psi(\boldsymbol{r},t)$ を決めることもできる．$A(\boldsymbol{p},t)$ が $|A(\boldsymbol{p},t)|^2$ を通して運動量情報を与えるといっても，それは元来 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ に仕込まれていた情報なのである．§2.2 でも述べたように，$\psi(\boldsymbol{r},t)$ と $A(\boldsymbol{p},t)$ とは数学的には全く同格であり，同一物の別の表現と考えなければならない．どちらの表現を用いるかは便宜上の問題であるが，主として，物理的観点が決める仕事である．粒子の位置を語るには $\psi(\boldsymbol{r},t)$ が比較的便利であり，運動量を見るには $A(\boldsymbol{p},t)$ が比較的好都合である．この意味で，$A(\boldsymbol{p},t)$ を

運動量表示(momentum representation)の波動関数または状態関数という．略して p 表示という場合もある．これに対して $\psi(\boldsymbol{r},t)$ を座標表示または単に x 表示とか q 表示とよぶことがある．このように，着目した力学量の情報はそれを見やすくしてくれる表示を用いて記述する方がよい．したがって私達は位置座標や運動量以外の力学量を見やすくする表示をどのようにして構成するのかという問題に直面する．また，各種の力学量に対応して多様な表示が現れることになれば，表示の具体的選択に依存しない形式で理論体系を築き上げる必要を感ずるであろう．私達はまず運動量表示と座標表示の関係をしらべながら，漸次これらの問題を解決してゆこうと思う．この仕事により，波動力学という歴史的および直観的な理論段階を踏み越えて，より広汎な理論体系である量子力学の形成へと進むのである．

a) 確率解釈規定と力学量規定

まず，波動力学の第3法則を一般的な形式に書き改めよう．そのため，$\psi(\boldsymbol{r},t)$ から $A(\boldsymbol{p}',t)$ を与える式(*2.2.7*)を見直したい．関数内積の記号を用いれば，(*2.2.7*)は

$$A(\boldsymbol{p}',t)=(\phi_{\boldsymbol{p}'},\psi)\,;\quad \phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}\right) \tag{3.1.1}$$

と書くことができる．同様に，$\psi(\boldsymbol{r}',t)$ 自身も

$$\psi(\boldsymbol{r}',t)=(\chi_{\boldsymbol{r}'},\psi)\,;\quad \chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r})=\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{3.1.2}$$

と書いてよい．ゆえに，第3法則は $|(\chi_{\boldsymbol{r}'},\psi)|^2$ が存在確率密度を，$|(\phi_{\boldsymbol{p}'},\psi)|^2$ が運動量確率分布を与えると規定したことになっている．この形は確率解釈規定としての第3法則を一般化する方式を暗示しているように見える．すなわち，この暗示にしたがって確率解釈に関する新法則として

“状態 ψ において状態 φ を見出すことの確率は $|(\varphi,\psi)|^2$ に比例する”

という規定を採用することにしよう．状態 ψ または状態 φ と略記したが，丁寧にいえば，力学系が関数 ψ または関数 φ で記述される状態にあるという意味である(これからも，しばしば，この種の略式呼称を用いる)．この法則は $\varphi=\chi_{\boldsymbol{r}'}$ に対して存在確率密度 $|\psi(\boldsymbol{r}',t)|^2$ を与え，$\varphi=\phi_{\boldsymbol{p}'}$ に対して運動量確率分布 $|A(\boldsymbol{p}',t)|^2$ を与えるので，たしかに第3法則を内包した拡張になっている．新法則においては，位置と運動量の確率規定を並記する必要はもはやないわけであるから，状態

関数の確率解釈規定として見れば，一応満足すべき一般化であるといえよう．しかしながら，第3法則が具体的表示——座標表示と運動量表示——と切り離せない形で主張していた位置座標と運動量のとる値についての情報記述が表面から姿を消してしまった．この情報記述を新法則に適合する形で復活させるためには，別途に $\chi_{\boldsymbol{r}'}$ と $\phi_{\boldsymbol{p}'}$ の物理的説明を与える規定を——一般化した形で——導入しなければならない．いいかえれば，力学量のとる値と状態関数の関係について一般的規定を設定する必要が生じたのである．私達の当面の仕事は，第3法則を状態関数の確率解釈規定と力学量規定に分割し，その両者を一般化することである．

力学量規定の問題に進む前に，上記の新法則が表示の具体的選択に依存しない形になっていることを示そう．(*2.2.7*)による $\varphi(\boldsymbol{r})$ の Fourier 変換を $\tilde{\varphi}(\boldsymbol{p})$ としよう．すなわち，

$$\tilde{\varphi}(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int \varphi(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)d^3\boldsymbol{r}. \qquad (3.1.3)$$

この記号で統一して，$\psi(\boldsymbol{r})$ の Fourier 変換 $A(\boldsymbol{p})$ を $\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})$ と書き直せば，Fourier 変換の性質により，関係式

$$\begin{aligned}(\varphi, \psi) &= \int \varphi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r} \\ &= \int \tilde{\varphi}^*(\boldsymbol{p})\tilde{\psi}(\boldsymbol{p})d^3\boldsymbol{p} = (\tilde{\varphi}, \tilde{\psi}) \qquad (3.1.4)\end{aligned}$$

が得られる．この関係式は，x 表示でつくった内積 (φ, ψ) が p 表示でつくった内積 $(\tilde{\varphi}, \tilde{\psi})$ に等しいことを示している．ゆえに，確率振幅 (φ, ψ)——したがって，確率 $|(\varphi, \psi)|^2$ は表示の選択に依存しない．この証明は座標表示と運動量表示だけにかかわるものであるが，他の力学量を見やすくする表示をつくる場合，状態関数の内積である確率振幅を不変に保つよう工夫しなければならない．

確率解釈に関する新法則は**遷移確率**(transition probability)の規定を内包している．いま力学系が時刻 $t=0$ で状態 $\varphi_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{r})$ にあったとしよう．この初期条件に適合する Schrödinger 方程式の解が $\psi_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{r}, t)$ であるとすれば(すなわち，$\psi_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{r}, 0) = \varphi_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{r})$)，後の時刻 t (>0) のとき力学系が状態 $\varphi_{\mathrm{F}}(\boldsymbol{r})$ で見出されることの確率——すなわち，遷移 I→F が起こることの確率は，上記の新法則により

$$W_{\mathrm{FI}}(t) = \left|\int \varphi_{\mathrm{F}}^*(\boldsymbol{r})\psi_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{r}, t)d^3\boldsymbol{r}\right|^2 \qquad (3.1.5)$$

となる．これが遷移確率であり，量子力学の中で重要な役割を演ずる．

さて，力学量規定の問題に進もう．これまでのところ，力学量のとる値と状態関数の関係について明確な説明を与えた例は運動量とエネルギーの場合だけであった．運動量についての事情は明らかである．波動力学の出発点として設定した第1法則は，運動量 $\boldsymbol{p}'$ をもつ状態が平面波 $\phi_{\boldsymbol{p}'}$ によって記述されると規定している．この状態規定に合せて運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}=(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r})$ を導入したが((2.2.9)から(2.2.13)に到る道筋と(2.2.17)前後の議論を見よ)，これは平面波 $\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r})$ を固有関数としてもつ演算子として，すなわち，

$$\hat{\boldsymbol{p}}\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r})=\boldsymbol{p}'\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r}) \tag{3.1.6}$$

を成立させる演算子として定義されたものである．エネルギーの場合は順序が逆であった．はじめ古典論によって用意されたハミルトニアンから，その中の運動量を演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ でおきかえることによって量子力学的ハミルトニアン $\hat{H}$ をつくり，固有値問題 $\hat{H}u_\nu=E_\nu u_\nu$ の解である固有値 E_ν をエネルギーのとる値とし，固有関数 u_ν をエネルギー E_ν の状態と規定した．しかしながら，固有値方程式の物理的役割，すなわち，固有値と固有関数の物理的説明に関するかぎり，運動量もエネルギーも全く同形式の定式化を行ったことになっている．位置座標についてはどうか？ ハミルトニアン(2.2.19)中のポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ は位置座標 $\boldsymbol{r}$ の関数であるが，私達はこれを波動関数に掛け算する演算子として処理していたのである．したがって，位置座標演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ は，暗黙の内に，任意の波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ に座標変数 $\boldsymbol{r}=(x,y,z)$ を掛ける演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{r}\psi(\boldsymbol{r},t)$ として定義されていたことになる．ゆえに，固有値問題

$$\hat{\boldsymbol{r}}\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r})=\boldsymbol{r}'\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r}) \tag{3.1.7}$$

の解は，(3.1.2)で登場した関数 $\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r})=\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ にほかならない．これは，$\boldsymbol{r}\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=\boldsymbol{r}'\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ から明らかであろう．位置座標演算子の固有値問題の解に対しても，運動量やエネルギーの場合と同様の物理的説明を与えることにすれば，$\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r})$ は粒子が点 $\boldsymbol{r}'$ に存在する状態を記述するわけである．$\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ の関数形は正にこの説明にふさわしい．

$\chi_{\boldsymbol{r}'}$ と $\phi_{\boldsymbol{p}'}$ にこのような説明が付与されていれば，確率解釈に関する上記の新法則はただちに，‘状態 ψ において粒子が点 $\boldsymbol{r}'$ で見出されること’の確率として $|(\chi_{\boldsymbol{r}'},\psi)|^2$ を，‘状態 ψ において粒子が運動量 $\boldsymbol{p}'$ をもって見出されること’の確率

として $|(\phi_{\boldsymbol{p}'},\psi)|^2$ を与えてくれる．これはたしかに第3法則の再生である．

——なお，確率振幅 $(\chi_{\boldsymbol{r}'},\psi)=\psi(\boldsymbol{r}',t)$ および $(\phi_{\boldsymbol{p}'},\psi)=A(\boldsymbol{p}',t)$ は，それぞれ，ψ を関数列 $\{\chi_{\boldsymbol{r}'}\}$ および $\{\phi_{\boldsymbol{p}'}\}$ で展開したときの係数になっている．すなわち，

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\int\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r})(\chi_{\boldsymbol{r}'},\psi)\,d^3\boldsymbol{r}' \tag{3.1.8 a}$$

$$=\int\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r})(\phi_{\boldsymbol{p}'},\psi)\,d^3\boldsymbol{p}'. \tag{3.1.8 b}$$

これは関数列 $\{\chi_{\boldsymbol{r}'}\}$ および $\{\phi_{\boldsymbol{p}'}\}$ が

$$(\chi_{\boldsymbol{r}'},\chi_{\boldsymbol{r}''})=\delta^3(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}''),\qquad\int\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r})\chi_{\boldsymbol{r}'}{}^*(\boldsymbol{r}'')\,d^3\boldsymbol{r}'=\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'') \tag{3.1.9 a}$$

$$(\phi_{\boldsymbol{p}'},\phi_{\boldsymbol{p}''})=\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}''),\qquad\int\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r})\phi_{\boldsymbol{p}'}{}^*(\boldsymbol{r}'')\,d^3\boldsymbol{p}'=\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'') \tag{3.1.9 b}$$

という性質をもつ完全正規直交系であることの直接の結果である．完全性を表す各第2式に $\psi(\boldsymbol{r}'',t)$ をかけて $\boldsymbol{r}''$ について積分すれば直ちに(3.1.8)が得られる．(3.1.9)の各第1式は直交性と δ 関数式規格化条件を表している†．なお，(3.1.8 b)は(2.2.6)に他ならない．

ここまでくれば，力学量規定の一般的な姿はもう見えてきているといってよい．すなわち，量子力学における力学量は波動関数に作用する演算子として表現されるべきものであり，その固有値問題が解をもつと想定しなければならない．そして

“力学量のとる値はその力学量を表す演算子の固有値にかぎり，力学量が1つの値をとる状態はその固有値に属する固有関数によって表される”

という‘力学量規定’を採用すればよろしい．この規定は運動量，エネルギー，位置座標について述べてきた事柄を一般化して書き表したものである．しかし，それ以外の力学量を表す演算子をどのようにしてつくるかという問題が残されている．多くの場合，古典的力学量に対応する量子力学的力学量を求めることになる

† 次式を参考にするとよい．

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'')\cdot\boldsymbol{r}\right]d^3\boldsymbol{r}=\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'').$$

が，古典論は力学量を正準力学変数である位置座標と運動量の関数として用意している．§2.2では古典的ハミルトニアンから量子力学のハミルトニアンをつくったが，この方式を一般化し，古典論が与える力学量 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ から $\boldsymbol{p}$ を演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}=(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r})$ でおきかえて得られる演算子 $\hat{F}=F(\boldsymbol{r},(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r}))$ をもって，F に対応する量子力学的力学量演算子と規定することにしよう†．たとえば，軌道角運動量演算子は

$$\hat{\boldsymbol{L}}=\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar(y(\partial/\partial z)-z(\partial/\partial y),\ z(\partial/\partial x)-x(\partial/\partial z),\ x(\partial/\partial y)-y(\partial/\partial x))$$

である．しかしスピン角運動量のような直接古典的対応量をもたない量子力学的力学量に対しては，この方式を適用することはできない．各種の力学量についてのくわしい議論は量子力学の展開とともに次第に明らかになってゆくことと思う．

b）運動量表示における力学量演算子

こうして一般的な力学量規定にまで到達したわけであるが，物理的立場から見たとき，力学量演算子に対してどのような数学的性格を与えるべきかという課題には，まだあまり明確な形で答えていない．しかし，この仕事は次節まで延期し，ここでは座標表示と運動量表示の関係をもう少し掘り下げておこう．

これまで力学量はすべて座標表示の波動関数に作用する演算子として表されてきた．座標表示と運動量表示が同格であると主張するかぎり，運動量表示での力学量の姿を確定し，それが座標表示の力学量と全く同じ役割を果たすことを確認しなければならない．さらに，表示の具体的選択に依存しない方式で力学量を定式化する必要がある．まず $\hat{\boldsymbol{p}}$ の固有値方程式(3.1.6)を運動量表示に移行させよう．(3.1.6)に $(2\pi\hbar)^{-3/2}\exp(-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$ をかけて $\boldsymbol{r}$ について積分すれば，直ちに

$$\boldsymbol{p}\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{p})=\boldsymbol{p}'\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{p}) \qquad (3.1.10\,a)$$

が得られる．ただし，

$$\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{p})=\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)d^3\boldsymbol{r}=\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \qquad (3.1.10\,b)$$

とおいた．これが運動量表示における運動量演算子の固有値 $\boldsymbol{p}'$ に属する固有関数である．この場合，(3.1.10 a)からわかるように，運動量演算子は運動量変数 $\boldsymbol{p}$ をかける演算子になってしまった．習慣上，通常の数を **c** 数 (common num-

† 演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ の関数として $\hat{F}$ を定義したが，これは，$F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ を $\boldsymbol{p}$ について Taylor 展開し，$\boldsymbol{p}$ を $(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r})$ によっておきかえたものと理解すればよい．具体的方法については§3.2 b)を見よ．

ber)ということがある†. すなわち，運動量表示では運動量演算子はc数演算子 $\boldsymbol{p}$(c数 $\boldsymbol{p}$ をかける演算子という意味)になるのである．同様に，$\hat{\boldsymbol{r}}$ の固有値方程式 *(3. 1. 7)* から

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{p}) = \boldsymbol{r}'\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{p}) \tag{3.1.11a}$$

$$\begin{aligned}\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{p}) &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int \chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r})\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)d^3\boldsymbol{r} \\ &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}'\right)\end{aligned} \tag{3.1.11b}$$

が得られる．これは，運動量表示における位置座標が微分演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}=i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p})$ となり，固有値 $\boldsymbol{r}'$ に属する固有関数が *(3. 1. 11 b)* になったことを示している．

固有関数が $\chi_{\boldsymbol{r}'}, \phi_{\boldsymbol{p}'}$ から $\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}, \tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}$ に移行したとしても，それは単なる表示の変換であるから，それぞれの物理的説明はかわらない．事実，固有値方程式 *(3. 1. 10 a)* および *(3. 1. 11 a)* は座標表示の場合と全く同じ形を保存し，$\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}$ は粒子が点 $\boldsymbol{r}'$ に存在する状態を表し，$\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}$ は粒子が運動量 $\boldsymbol{p}'$ をもつ状態を表すという説明の根拠になっている．したがって，存在確率密度は $|(\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}, \tilde{\psi})|^2$ であり，運動量確率分布は $|(\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}, \tilde{\psi})|^2$ でなければならないが，*(3. 1. 4)* により $(\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}, \tilde{\psi}) = (\chi_{\boldsymbol{r}'}, \psi)$ および $(\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}, \tilde{\psi}) = (\phi_{\boldsymbol{p}'}, \psi)$ が成立するので，これらは座標表示が与えるものと完全に一致しており問題はない．

――なお，関数列 $\{\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}\}$ および $\{\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}\}$ は

$$(\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}, \tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}''}) = \delta^3(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}''), \qquad \int \tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{p})\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}{}^*(\boldsymbol{p}'')d^3\boldsymbol{r}' = \delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'') \tag{3.1.12a}$$

$$(\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}, \tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}''}) = \delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}''), \qquad \int \tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{p})\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}{}^*(\boldsymbol{p}'')d^3\boldsymbol{p}' = \delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'') \tag{3.1.12b}$$

という性質をもつが，これは *(3. 1. 9)* の Fourier 変換に他ならない．したがって，*(3. 1. 8)* の Fourier 変換として

† これに対して量子力学的力学量を表す演算子をq数ということがあるが，今はあまり使われていない．

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)=\int\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{p})(\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'},\tilde{\psi})\,d^3\boldsymbol{r}' \tag{3.1.13 a}$$

$$=\int\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{p})(\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'},\tilde{\psi})\,d^3\boldsymbol{p}' \tag{3.1.13 b}$$

が成立するのは当然であろう．確率振幅 $(\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'},\tilde{\psi})=\psi(\boldsymbol{r}',t)$ および $(\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'},\tilde{\psi})=A(\boldsymbol{p}',t)$ は $\tilde{\psi}$ を，それぞれ，$\{\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}\}$ および $\{\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}\}$ で展開したときの係数とみなすことができる．なお，(3.1.13 a)は(2.2.7)そのものである．

次に，一般の力学量 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ を表す運動量表示の演算子を求めよう．そのためには，$F(\boldsymbol{r},(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r}))\psi(\boldsymbol{r},t)$ を Fourier 変換し，$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)$ に作用する演算子を一括して取り出せばよい．具体的に実行すれば

$$\frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\int\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)F\left(\boldsymbol{r},\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)\psi(\boldsymbol{r},t)\,d^3\boldsymbol{r}$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\int F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}')\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{r}\right]\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}',t)\,d^3\boldsymbol{r}\,d^3\boldsymbol{p}'$$

$$=\int F\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}},\boldsymbol{p}'\right)\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p})\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}',t)\,d^3\boldsymbol{p}'$$

$$=F\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}},\boldsymbol{p}\right)\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)$$

となるから，$\hat{F}=F(i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p}),\boldsymbol{p})$ が求めるものである†．ただし，$\boldsymbol{r}\exp(-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)=i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p})\exp(-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$ を用いた．ハミルトニアン $H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ に対応する量子力学的ハミルトニアンは $H(i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p}),\boldsymbol{p})$ であるから，運動量表示の Schrödinger 方程式として

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)=H\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}},\boldsymbol{p}\right)\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t) \tag{3.1.14}$$

が得られる††．

このように見てくれば，運動量表示は座標表示と全く対等な資格と能力で量子力学を記述していることがわかる．事実，両表示の記述は，表3.1の比較対照表

---

† ここでは，演算子 $F(i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p}),\boldsymbol{p})$ は $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ を $\boldsymbol{r}$ について Taylor 展開し，$\boldsymbol{r}$ を $i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p})$ でおきかえて得られた演算子であるとしておこう．くわしくは§3.2 b)を見よ．

†† 運動量表示のハミルトニアンは，微分演算子 $H(i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p}),\boldsymbol{p})\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)$ の形よりも，積分演算子 $\int\langle\boldsymbol{p}|\hat{H}|\boldsymbol{p}'\rangle\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}',t)\,d^3\boldsymbol{p}'$ の形で用いる方が多い．ただし，

$$\langle\boldsymbol{p}|\hat{H}|\boldsymbol{p}'\rangle=(2\pi\hbar)^{-3}\int\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}')\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}\right)d^3\boldsymbol{r}.$$

に明示されているとおり，見事なほど対称的な姿を与えてくれる．私達は都合によってどちらの表示を用いてもよいが，物理的結果に対する理論的予言である存在確率密度や運動量確率分布などは，どの表示を用いて計算しても同じ答が得られるように仕組まれている．§2.3と§2.4では定常状態問題を座標表示で扱ったが，これはもちろん運動量表示でも処理できる仕事である．しかし，当然のことながら，境界条件の見掛けの形は表示によって異なる．ここで運動量表示の境界条件を説明している余裕はないが，散乱問題に関しては本講座第4巻『量子力学II』第12, 13章散乱理論のところにくわしい解説があるので参考にしてほしい．

表3.1 座標表示と運動量表示

	座標表示		運動量表示
波動関数	$\psi(\boldsymbol{r},t)$		$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)\ \ (=A(\boldsymbol{p},t))$
位置座標	$\boldsymbol{r}$		$i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}$
固有関数	$\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r})=\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$		$\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{p})=(2\pi\hbar)^{-3/2}\exp\left(-\dfrac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}'\right)$
運動量	$\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}$		$\boldsymbol{p}$
固有関数	$\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r})=(2\pi\hbar)^{-3/2}\exp\left(\dfrac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)$		$\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{p})=\delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')$
力学量 $F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$	$F\left(\boldsymbol{r},\dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)$		$F\left(i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}},\boldsymbol{p}\right)$
存在確率密度 $\lvert\psi(\boldsymbol{r}',t)\rvert^2=$	$\lvert(\chi_{\boldsymbol{r}'},\psi)\rvert^2$	$=$	$\lvert(\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'},\tilde{\psi})\rvert^2$
運動量確率分布 $\lvert A(\boldsymbol{p}',t)\rvert^2=$	$\lvert(\phi_{\boldsymbol{p}'},\psi)\rvert^2$	$=$	$\lvert(\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'},\tilde{\psi})\rvert^2$

座標表示と運動量表示を数学的立場から見直そう．いうまでもなく，位置座標をc数演算子にする表示が座標表示であり，運動量をc数演算子にとる表示が運動量表示である．言い換えれば，座標表示とは$\hat{\boldsymbol{r}}$の固有関数列$\{\chi_{\boldsymbol{r}'}\}$または$\{\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}\}$を表現の基準系としてえらんだ表示であり，運動量表示とは$\hat{\boldsymbol{p}}$の固有関数列$\{\phi_{\boldsymbol{p}'}\}$または$\{\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}\}$を表現の基準系としてもつ表示のことである．はじめの頃，力学量を見やすくする表示などというあいまいな説明をしていたが，いまや，明確な定義を与えることができる．ある力学量を見やすくする表示とはその力学量をc数演算子にする表示，すなわち，その力学量演算子の固有関数列を表現の基準

系として採用した表示のことである．なお，‘ある力学量を見やすくする表示’というより‘ある力学量を**対角化**(diagonalize)する表示’という言葉がひろく用いられている．‘対角化’という言葉の由来は量子力学の行列形式までゆけば，自ずから理解されよう．

さて，これまでしばしば座標表示から運動量表示への変換を実行した．座標表示と運動量表示の間の変換は，変換関数

$$(\chi_{\boldsymbol{r}'}, \phi_{\boldsymbol{p}'}) = (\tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}, \tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'\right), \qquad (3.1.15\,a)$$

$$(\phi_{\boldsymbol{p}'}, \chi_{\boldsymbol{r}'}) = (\tilde{\phi}_{\boldsymbol{p}'}, \tilde{\chi}_{\boldsymbol{r}'}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}'\right) \qquad (3.1.15\,b)$$

を積分核とするFourier変換である．(*2.2.6*)と(*2.2.7*)を書き直せば

$$\psi(\boldsymbol{r}', t) = \int (\chi_{\boldsymbol{r}'}, \phi_{\boldsymbol{p}'})\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}', t)\, d^3\boldsymbol{p}' \qquad (3.1.16\,a)$$

$$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}', t) = \int (\phi_{\boldsymbol{p}'}, \chi_{\boldsymbol{r}'})\psi(\boldsymbol{r}', t)\, d^3\boldsymbol{r}' \qquad (3.1.16\,b)$$

となるので，$(\chi_{\boldsymbol{r}'}, \phi_{\boldsymbol{p}'})$が運動量表示から座標表示への変換を，$(\phi_{\boldsymbol{p}'}, \chi_{\boldsymbol{r}'})$が座標表示から運動量表示への変換を与える†．(*3.1.16*)は数学的にはFourier変換公式であり物理的には波動力学第2法則の要求する平面波の‘重ね合せ’であった．私達はいまこのような足場を清算してより広汎な理論体系としての量子力学を形成しようとしている．とすれば，(*3.1.16*)を表示設定の枠内，すなわち$\hat{\boldsymbol{r}}$と$\hat{\boldsymbol{p}}$の固有値問題から導き出す方式を確立しておかなければならない．これはすでに(*3.1.9*)または(*3.1.12*)によって用意されている．(*3.1.9 b*)第2式に$\chi_{\boldsymbol{r}'}{}^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}'', t)$をかけて$\boldsymbol{r}$と$\boldsymbol{r}''$について積分し，$\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}', t) = (\phi_{\boldsymbol{p}'}, \psi)$とおけば直ちに(*3.1.16 a*)が得られるからである．(*3.1.16 b*)も同様．この方式はすぐに一般化できる．たとえば，2個の力学量があったとき，一方の力学量を対角化する表示と他方の力学量を対角化する表示の間の変換関数は，それぞれの力学量の固有関数の内積として与えられる．この種の関係を一般的に定式化するのが変換論の仕事である．第4章を見ていただきたい．

---

† このとき$(\chi_{\boldsymbol{r}'}, \phi_{\boldsymbol{p}'})^* = (\phi_{\boldsymbol{p}'}, \chi_{\boldsymbol{r}'})$が成立していることに注意せよ．

c) 量子条件と交換関係

最後に，表示に依存しない力学量の定式化を考えよう．もう一度表 3.1 を見ていただきたい．座標表示では，位置座標が c 数 $\boldsymbol{r}$ となり運動量が $\boldsymbol{r}$ についての微分演算子 $(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r})$ になった．運動量表示では，運動量が c 数 $\boldsymbol{p}$ であり位置座標が $\boldsymbol{p}$ についての微分演算子 $i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p})$ であった．この完璧な役割交換と各演算子の単純な形は極めて簡単な数学的関係の存在を暗示しているように見える．事実，$(\partial x/\partial x)=1$, $(\partial x/\partial y)=0$, … という微分演算子の特質を反映した恒等式

$$\left\{x\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}x\right\}\psi(\boldsymbol{r},t)=-\psi(\boldsymbol{r},t),$$

$$\left\{x\frac{\partial}{\partial y}-\frac{\partial}{\partial y}x\right\}\psi(\boldsymbol{r},t)=0,$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

が存在し，これが任意の波動関数に対して成立するので

$$x\hat{p}_x-\hat{p}_x x=i\hbar, \qquad x\hat{p}_y-\hat{p}_y x=0, \qquad \cdots \tag{3.1.17}$$

という演算子関係式が得られる．ただし，$\hat{p}_x=(\hbar/i)(\partial/\partial x)$, … であることはいうまでもない．上記の恒等式を運動量表示に変換すれば，

$$\left\{\frac{\partial}{\partial p_x}p_x-p_x\frac{\partial}{\partial p_x}\right\}\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)=\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t),$$

$$\left\{\frac{\partial}{\partial p_x}p_y-p_y\frac{\partial}{\partial p_x}\right\}\tilde{\psi}(\boldsymbol{p},t)=0,$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

となり，演算子関係式

$$\hat{x}p_x-p_x\hat{x}=i\hbar, \qquad \hat{x}p_y-p_y\hat{x}=0, \qquad \cdots \tag{3.1.18}$$

が成立する．ただし，$\hat{x}=i\hbar(\partial/\partial p_x)$, …．(3.1.17) は座標表示の関係式，(3.1.18) は運動量表示の関係式であるが，各演算子の具体形が違うだけで，関係式そのものの形は全く同じである．したがって，本来

$$\hat{x}_\alpha\hat{p}_\beta-\hat{p}_\beta\hat{x}_\alpha=i\hbar\delta_{\alpha\beta} \qquad (\alpha,\beta=1,2,3) \tag{3.1.19 a}$$

という力学量の関係式が，表示の具体的選択とは無関係に存在していると考えることができる．この他に自明な関係式

$$\left.\begin{aligned}\hat{x}_\alpha\hat{x}_\beta-\hat{x}_\beta\hat{x}_\alpha&=0\\ \hat{p}_\alpha\hat{p}_\beta-\hat{p}_\beta\hat{p}_\alpha&=0\end{aligned}\right\} \qquad (\alpha,\beta=1,2,3) \tag{3.1.19 b}$$

を付加しておこう．

私達は具体的な座標表示と運動量表示から出発して，表示に依存しない抽象的な力学量関係式(*3. 1. 19*)に到達した．この順序を逆にして，はじめに(*3. 1. 19*)を設定したと考えてみよう．すなわち，そもそも‘量子力学的力学量である位置座標 $\hat{\boldsymbol{r}}$ と運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}$ は関係式(*3. 1. 19*)を満足しなければならない’と規定するのである．次の段階として座標表示を採用すれば，位置座標はすべてc数 x_α $(\alpha=1, 2, 3)$ となるから，(*3. 1. 19*)は運動量演算子の具体形を決める条件式となり $\hat{p}_\beta=(\hbar/i)(\partial/\partial x_\beta)$ $(\beta=1, 2, 3)$ を与えてくれる†．ゆえに，直ちに運動量固有関数 $\phi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{r})=(2\pi\hbar)^{-3/2}\exp(i\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$ が求められるが，これは運動量一定の状態が平面波で表されるという第1法則への復帰に他ならない．さらに関数列 $\{\phi_{\boldsymbol{p}'}\}$ の完全正規直交性は(*3. 1. 16*)を導出し，第2法則の枠組を提供するという結果を与える．同様に，運動量表示をとれば運動量がc数となるので，(*3. 1. 19*)は位置座標が微分演算子 $\hat{x}_\alpha=i\hbar(\partial/\partial p_\alpha)$ $(\alpha=1, 2, 3)$ となるべきことを教えてくれる．この道からも(*3. 1. 16*)に到達することができる．正に，de Broglie 仮説と干渉実験をもとに第1および第2法則を設定し営々として帰納的に登りつめた道筋を，関係式(*3. 1. 19*)を出発点とする数学的演繹によって一気に駆け下った想いがする．この事情を仔細に検討すれば，私達が量子力学の出発点とした粒子・波動の二重性という実験事実は関係式(*3. 1. 19*)の設定と同等であることがわかるであろう．その意味で関係式(*3. 1. 19*)を**量子条件**(quantum condition)とよぶことがある．私達は表示に依存しない力学量の定式化を追求して，量子力学の根源ともいうべき量子条件(*3. 1. 19*)に到達したのである．

量子条件(*3. 1. 19*)は演算子 $\hat{x}_\alpha$ と $\hat{p}_\alpha$ が交換可能でないことを示している．これからも交換不可能な演算子がしばしば登場するので，

$$[\hat{a}, \hat{b}]=\hat{a}\hat{b}-\hat{b}\hat{a} \qquad (3.\,1.\,20)$$

という記号を導入しておくのが便利である．これを演算子 $\hat{a}, \hat{b}$ の**交換子**(commutator)とよぶ．また，交換子に対する値の指定などのような，交換子を含む関係式を**交換関係**(commutation relation)という．すなわち，位置座標と運動量は

† 厳密にいえば，これに $\boldsymbol{r}$ の実関数を加えたものを与える．しかし，この関数を波動関数の位相調節によって吸収し，座標表示の運動量を微分演算子だけで書くことは常に可能である．運動量表示の位置座標についても同様のことがいえる．

交換関係

$$\left.\begin{aligned}[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta] &= i\hbar\delta_{\alpha\beta} \\ [\hat{x}_\alpha, \hat{x}_\beta] = 0, \quad [\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] &= 0\end{aligned}\right\} \quad (\alpha, \beta=1, 2, 3) \tag{3.1.21}$$

を満足するわけである．ところで，この交換関係は古典的な正準力学変数の組 (x_α, p_α) に対する関係式

$$\left.\begin{aligned}\{x_\alpha, p_\beta\} &= \delta_{\alpha\beta} \\ \{x_\alpha, x_\beta\} = 0, \quad \{p_\alpha, p_\beta\} &= 0\end{aligned}\right\} \quad (\alpha, \beta=1, 2, 3) \tag{3.1.22}$$

によく似ている．ただし，$\{a, b\}$ は力学量 a, b に対する Poisson 括弧式である．したがって，この相似は

$$\{a, b\} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[\hat{a}, \hat{b}] \tag{3.1.23}$$

という‘おきかえ’によって古典力学が量子力学に変身することを暗示している．また，交換子は恒等式

$$[\hat{a}, \hat{b}] = -[\hat{b}, \hat{a}]$$
$$[\hat{a}, C] = 0, \quad [C\hat{a}, \hat{b}] = C[\hat{a}, \hat{b}] \qquad (C \text{ は定数})$$
$$[\hat{a}+\hat{b}, \hat{c}] = [\hat{a}, \hat{c}]+[\hat{b}, \hat{c}]$$
$$[\hat{a}\hat{b}, \hat{c}] = \hat{a}[\hat{b}, \hat{c}]+[\hat{a}, \hat{c}]\hat{b}$$
$$[\hat{a}, [\hat{b}, \hat{c}]]+[\hat{b}, [\hat{c}, \hat{a}]]+[\hat{c}, [\hat{a}, \hat{b}]] = 0 \qquad (\text{Jacobi の恒等式})$$

を満足するが，これらは，交換子を Poisson 括弧式でおきかえれば，そのまま Poisson 括弧式に対する恒等式としても成立する．(そのさい，もちろん，演算子 $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$ は古典的力学量 a, b, c にとりかえるわけである.) したがって，‘おきかえ’(3.1.23) が数学的矛盾を導入することは決してない．このような観点から，‘おきかえ’(3.1.23) を**量子化** (quantization) の規則と考えることができる．

さて，古典的関係式 (3.1.22) は力学変数 x_α, p_α が互いに正準共役であることの条件式とみなすべきものであった．これに対応して，(3.1.21) を量子力学における正準共役条件ということができよう．座標表示と運動量表示における位置座標と運動量の単純な形と完璧な役割交換は，それらが正準共役であることの直接の結果である．

§3.2 力学量とその観測

前節において私達は一般的な力学量規定を導入した．これは波動力学の段階で親しんだ運動量，位置座標，エネルギーという力学量の物理的役割を一般化したものである．これらの力学量を表す演算子は，数学的には定義または構成方法から明らかなように，線形 Hermite 演算子であり，固有関数列が完全系をつくっていた．一般的な力学量演算子に対しても，私達は同じ数学的性質を要求しようと思う．まず，この数学的性質——(i)線形性，(ii)Hermite 性，(iii)固有関数列の完全性を必要とする物理的背景について説明する．

a) 力学量演算子の線形性

波動力学段階の力学量演算子は，はじめから微分演算子または c 数演算子またはその組み合せとして導入されてきたので，線形性はむしろ自明であった．ここでは，私達は線形性が必要である原理的理由を表示の具体形に依存しない方法で説明したいのである．線形性は‘重ね合せ’の原理から要求される．その事情をまずハミルトニアン $\hat{H}$ についてしらべてみよう．$\hat{H}$ は Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi \tag{3.2.1}$$

に登場し，力学系の時間発展を支配する重要な演算子である．運動状態 a および b を記述する波動関数をそれぞれ ψ_a および ψ_b とすれば，a と b が同時に許される場合の波動関数 ψ_{ab} は‘重ね合せ’の原理により $\psi_{ab}=\psi_a+\psi_b$ となるが，ψ_a, ψ_b, ψ_{ab} はいずれも Schrödinger 方程式(3.2.1)を満足するはずである．ゆえに，

$$\hat{H}(\psi_a+\psi_b)=\hat{H}\psi_a+\hat{H}\psi_b$$

が成立する．すなわち，$\hat{H}$ は線形でなければならない．この証明が表示の具体形に依存しないことは明らかであろう．

——線形性問題に直接関係ないが，(3.2.1)の形式解

$$\psi(t)=\hat{U}(t)\psi_0;\qquad \hat{U}(t)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) \tag{3.2.2}$$

にふれておこう．ψ_0 は $t=0$ における初期状態を表す．(3.2.2)の証明は簡単である．まず，演算子 $\hat{A}$ の指数関数は

$$\exp(\hat{A})=1+\frac{1}{1!}\hat{A}+\frac{1}{2!}\hat{A}^2+\frac{1}{3!}\hat{A}^3+\cdots \tag{3.2.3}$$

によって定義されるものである．$\hat{A}=-(i\hat{H}t/\hbar)$ とおけば(3.2.2)の $\hat{U}(t)$ が得られる($\hat{H}$ が線形だから $\hat{U}(t)$ も線形となる)が，定義(3.2.3)から初期条件 $\hat{U}(0)=1$ と演算子型の Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{d\hat{U}(t)}{dt}=\hat{H}\hat{U}(t) \tag{3.2.4}$$

を導出できる．ゆえに，(3.2.2)はたしかに与えられた初期条件を満足する(3.2.1)の解である．さらに，演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が交換可能なときに成立する恒等式 $\exp(\hat{A})\exp(\hat{B})=\exp(\hat{A}+\hat{B})$ を用いれば($\hat{A}\hat{B}\neq\hat{B}\hat{A}$ の場合，この等式は成立しない)，$\hat{U}(t+t')=\hat{U}(t')\hat{U}(t)$ または $\psi(t+t')=\hat{U}(t')\psi(t)$ を証明することができる．そこで t' を微小量 δt に等しいとおいて $(\delta t)^2$ 以上の項を無視すれば

$$\hat{U}(\delta t)=1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t \qquad \text{または} \qquad \psi(t+\delta t)=\left(1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\delta t\right)\psi(t) \tag{3.2.5}$$

が得られる．これは $\hat{H}$ が力学系の無限小時間発展 $(t\to t+\delta t)$ を与える生成演算子であることを意味している．なお，$\hat{H}$ の Hermite 性($\hat{H}^\dagger=\hat{H}$ であること，ただし $\hat{H}^\dagger$ は $\hat{H}$ の Hermite 共役演算子)により $\hat{U}(t)$ のユニタリー性(unitarity)

$$\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t)=\hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t)=1 \tag{3.2.6}$$

を示すことができる．ゆえに，$(\psi(t),\psi(t))=(\psi_0,\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t)\psi_0)=(\psi_0,\psi_0)$ となるが，これは確率保存則に他ならない．

次に運動量演算子の線形性を議論しよう．まず演算子

$$\hat{U}_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}_0)=\exp\left(\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{r}_0\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right) \tag{3.2.7}$$

を導入し，波動関数 ψ に作用させて

$$\psi_{\boldsymbol{r}_0}=\hat{U}_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}_0)\psi \tag{3.2.8}$$

をつくり，その効果をしらべよう．座標表示でこの式を書き下し，演算子と関数に対する Taylor 展開公式を使って整理すれば，直ちに

$$\begin{aligned}\psi_{\boldsymbol{r}_0}(\boldsymbol{r},t)&=\exp\left(\boldsymbol{r}_0\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)\psi(\boldsymbol{r},t)\\&=\left[1+\frac{1}{1!}\left(\boldsymbol{r}_0\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)+\frac{1}{2!}\left(\boldsymbol{r}_0\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)^2+\cdots\right]\psi(\boldsymbol{r},t)\\&=\psi(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}_0,t)\end{aligned} \tag{3.2.9}$$

となる．したがって，$\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)$ は力学系全体を元の位置から $\boldsymbol{r}_0$ だけ‘移動’させる演算子である．(*3. 2. 9*) 自身は座標表示の関係式であるが，演算子 $\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)$ の意味づけそのものは表示の変更によって変わるものではない．いま，とくに無限小移動 $\boldsymbol{r}_0=\delta\boldsymbol{r}$ をとれば，(*3. 2. 8*) は

$$\psi_{\delta r} = \left[1+\frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right]\psi \tag{3.2.10}$$

となる．この意味で，運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}$ は力学系の無限小移動を与える生成演算子の役割を演じている．さて，運動状態 a, b とそれらを $\boldsymbol{r}_0$ だけ‘ずらせた’運動状態 a', b' を考えれば，それぞれの波動関数は $\psi_{a'}=\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)\psi_a$，$\psi_{b'}=\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)\psi_b$ という関係を満足するはずである．さらに，a, b 双方が同時に許された運動状態の波動関数 ψ_{ab} とそれを $\boldsymbol{r}_0$ だけ‘ずらせた’運動状態の波動関数 $\psi_{a'b'}$ はやはり $\psi_{a'b'}=\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)\psi_{ab}$ を満足しなければならない．一方，‘重ね合せ’の原理は $\psi_{ab}=\psi_a+\psi_b$ および $\psi_{a'b'}=\psi_{a'}+\psi_{b'}$ を要求する．ゆえに，$\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)$ は線形でなければならない．同じことであるが，無限小移動 $\boldsymbol{r}_0=\delta\boldsymbol{r}$ に対しては，$\hat{\boldsymbol{p}}$ の線形条件 $\hat{\boldsymbol{p}}(\psi_a+\psi_b)=\hat{\boldsymbol{p}}\psi_a+\hat{\boldsymbol{p}}\psi_b$ が要求される．すなわち，‘重ね合せ’の原理に矛盾しないためには運動量演算子は線形でなければならない．

——$\hat{\boldsymbol{p}}$ が Hermite であるため $\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)$ はユニタリー演算子となり，(*3. 2. 6*) と同形の性質をもつ．ゆえに，$\hat{U}_p^\dagger(\boldsymbol{r}_0)=\hat{U}_p^{-1}(\boldsymbol{r}_0)=\exp(-i\boldsymbol{r}_0\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/\hbar)$．そこで，位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ の $\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)$ によるユニタリー変換を計算すれば次のような結果を得る：

$$\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)\hat{\boldsymbol{r}}\hat{U}_p^\dagger(\boldsymbol{r}_0) = \hat{\boldsymbol{r}}+\boldsymbol{r}_0. \tag{3.2.11}$$

証明は読者に委せるが，一般的な演算子の展開式

$$\exp(\hat{A})\hat{B}\exp(-\hat{A}) = \hat{B}+\frac{1}{1!}[\hat{A}, \hat{B}]+\frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]+\cdots \tag{3.2.12}$$

と交換関係 (*3. 1. 21*) を用いれば簡単にできる．(*3. 2. 11*) からも $\hat{U}_p(\boldsymbol{r}_0)$ が力学系を $\boldsymbol{r}_0$ だけ‘移動’させる演算子であることを知る．しかも，これは表示に依存しない説明である．移動演算子という機能は交換関係 (*3. 1. 21*) に由来する．

同じような筋道により，位置座標の線形性がやはり‘重ね合せ’の原理に矛盾しないために必要となる事情を説明することができる．そのさい，運動量の値を $\boldsymbol{p}_0$

だけ(または微小量 $\delta\boldsymbol{p}$ だけ)増加させるユニタリー演算子

$$\hat{U}_{\boldsymbol{r}}(\boldsymbol{p}_0)=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}_0\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\right)\qquad\text{または}\qquad\hat{U}_{\boldsymbol{r}}(\delta\boldsymbol{p})=1-\frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{p}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\tag{3.2.13}$$

を利用すればよい．今度は位置座標 $\hat{\boldsymbol{r}}$ が力学系の運動量を無限小増加させる生成演算子になっている．古典力学の知識によれば，エネルギーと時間，運動量と位置座標は互いに正準共役の関係にある．いま見てきた線形性の要求は，$\hat{H},\hat{\boldsymbol{p}},\hat{\boldsymbol{r}}$ などの力学量がそれぞれの正準共役量の無限小増加を与える生成演算子であるという機能と，'重ね合せ'の原理が矛盾しないために必要なものであった．これは決して $\hat{H},\hat{\boldsymbol{p}},\hat{\boldsymbol{r}}$ だけにかぎる特殊な事情ではない．原理的には，任意の力学量に対して同じような筋書が成立するはずである．たとえば，軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}=\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ の各座標成分はその座標軸のまわりの無限小回転に対する生成演算子であり，線形性については $\hat{H},\hat{\boldsymbol{p}},\hat{\boldsymbol{r}}$ と同様の議論をすることができる．しかしながら，すべての力学量に対してそれぞれの正準共役量を明瞭な形で定式化しなければ，線形性について語ることができないというわけではない．幸い，多くの場合，力学量は $\hat{\boldsymbol{r}}$ と $\hat{\boldsymbol{p}}$ だけの関数として表されている．したがって，$\hat{\boldsymbol{r}}$ と $\hat{\boldsymbol{p}}$ が線形であれば，その関数である力学量もやはり線形演算子となる．

b) 力学量演算子の Hermite 性と固有関数列の完全性

Hermite 演算子の特徴は，固有値が実数であり，異なる固有値に属する固有関数が直交するという性質にある．力学量演算子に Hermite 性を要求する根拠は，この 2 つの性質を必要とする物理的背景の中に求めなければならない．固有値の実数性については，おそらく特別な説明は不要であろう．多くの古典的力学量は通常実数であったから，それに対応する量子力学的力学量のとる値が実数であるとする要求はほとんど自明である．ここでは，固有関数に直交性を要求する物理的根拠について考えたい．いま，ある力学量演算子 $\hat{F}$ の固有値問題

$$\hat{F}u_\nu=\lambda_\nu u_\nu\tag{3.2.14}$$

を取り上げよう．λ_ν は $\hat{F}$ の固有値，u_ν は λ_ν に属する $\hat{F}$ の固有関数である．すでにハミルトニアンの場合について証明しておいたように，演算子 $\hat{F}$ が Hermite であれば——すなわち，$\hat{F}^\dagger=\hat{F}$ であれば，固有値 λ_ν は実数となり固有関数 u_ν は直交性

$$(u_\nu, u_{\nu'}) = 0 \qquad (\lambda_\nu \neq \lambda_{\nu'}) \tag{3.2.15}$$

をもつ†. 固有関数が直交性(3.2.15)をもたなければならないとする要求は，実は，前節 a)において設定した確率解釈と力学量に関する一般的規定の論理的帰結なのである．力学量規定によれば，力学系が演算子 $\hat{F}$ の固有関数 u_ν で記述される状態にあるとき，演算子 $\hat{F}$ によって表される力学量(略して力学量 $\hat{F}$)は確定値 λ_ν をとる．したがって，この規定は同時に，状態 u_ν における力学量 $\hat{F}$ の測定が他の値 $\lambda_{\nu'}$ ($\neq\lambda_\nu$) を与える可能性を拒否するものである．すなわち，状態 u_ν において力学量 $\hat{F}$ が値 $\lambda_{\nu'}$ ($\neq\lambda_\nu$) をとる事象の確率——同じことであるが——状態 u_ν において状態 $u_{\nu'}$ ($\lambda_{\nu'}\neq\lambda_\nu$) を見出す事象の確率がゼロになることを要求している．確率解釈規定によれば，この確率は $|(u_{\nu'}, u_\nu)|^2=|(u_\nu, u_{\nu'})|^2$ に比例する．ゆえに，直交性(3.2.15)を必要とする．これが力学量演算子に Hermite 性を要求する理由である．

Hermite 演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ の和 $\hat{A}+\hat{B}$ は Hermite であるが，積 $\hat{A}\hat{B}$ は $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が交換可能でなければ Hermite 性をもたない——$(\hat{A}\hat{B})^\dagger=\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger=\hat{B}\hat{A}\neq(\hat{A}\hat{B})$．そのため，古典的力学量を与えてそれに対応する量子力学的力学量演算子をつくるさい注意と工夫が必要となる．たとえば，xp_x という古典的力学量をそのまま演算子化して $\hat{x}\hat{p}_x$ または $\hat{p}_x\hat{x}$ とおいても，$\hat{x}\hat{p}_x\neq\hat{p}_x\hat{x}$ のため Hermite 演算子は得られない．そこで $(1/2)(\hat{x}\hat{p}_x+\hat{p}_x\hat{x})$ と対称化し，これを xp_x に対応する量子力学的力学量演算子として採用すれば，Hermite 性が確保できる．この種の対応を一般化した Weyl の方法について説明しておこう．まず，古典的力学量 $F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ から Fourier 変換

$$F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) = \int\!\!\int \tilde{F}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) \exp\left[i(\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p})\right] d^3\boldsymbol{\xi} d^3\boldsymbol{\eta} \tag{3.2.16 a}$$

$$\tilde{F}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \frac{1}{(2\pi)^6}\int\!\!\int F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) \exp\left[-i(\boldsymbol{\xi}\cdot\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{p})\right] d^3\boldsymbol{r} d^3\boldsymbol{p} \tag{3.2.16 b}$$

によって $\tilde{F}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta})$ を求め，これを用いて $F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ に対応する量子力学的力学量演算子 $F(\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{p}})$ を

---

† 念のため証明しておこう．(3.2.14)から $\lambda_\nu=(u_\nu, \hat{F}u_\nu)/(u_\nu, u_\nu)$ であるが，$(u_\nu, u_\nu)^*=(u_\nu, u_\nu)$ および $(u_\nu, \hat{F}u_\nu)^*=(\hat{F}u_\nu, u_\nu)=(u_\nu, \hat{F}^\dagger u_\nu)=(u_\nu, \hat{F}u_\nu)$ から $\lambda_\nu^*=\lambda_\nu$，すなわち，$\lambda_\nu$ の実数性がわかる．また，$(\lambda_\nu-\lambda_{\nu'})(u_\nu, u_{\nu'})=(\hat{F}u_\nu, u_{\nu'})-(u_\nu, \hat{F}u_{\nu'})=(u_\nu, (\hat{F}^\dagger-\hat{F})u_{\nu'})=0$ から，$\lambda_\nu\neq\lambda_{\nu'}$ に対して $(u_\nu, u_{\nu'})=0$ を得る．いずれも，Hermite 性 $\hat{F}^\dagger=\hat{F}$ から出てくる性質である．

$$F(\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{p}}) = \int\!\!\int \tilde{F}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) \exp\left[i(\boldsymbol{\xi}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}+\boldsymbol{\eta}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\right] d^3\boldsymbol{\xi} d^3\boldsymbol{\eta} \qquad (3.2.17)$$

と定義するのである．ここで，$\hat{\boldsymbol{r}}$ と $\hat{\boldsymbol{p}}$ は交換関係(*3.1.21*)を満足する位置座標および運動量演算子であり，指数関数はベキ級数展開(*3.2.3*)によって与えられたものとする．量子力学的性格はもっぱら交換関係(*3.1.21*)を通してもち込まれているわけである．古典的力学量 $F(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p})$ の実数性は $\tilde{F}^*(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) = \tilde{F}(-\boldsymbol{\xi}, -\boldsymbol{\eta})$ に反映されているが，これを用いれば，演算子 $F(\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{p}})$ の Hermite 性を証明することは容易である．線形性は自明であろう．$F = xp_x$ の場合 $\tilde{F} = -(\partial/\partial\xi_x)(\partial/\partial\eta_x)\delta^3(\boldsymbol{\xi})\delta^3(\boldsymbol{\eta})$ となり，(*3.2.17*)は自動的に上記の対称化を与える．数学的な事柄については第4章および本講座第4巻『量子力学II』第16章でくわしく吟味する機会がある．

さて，力学系が一般的な状態 ψ にあるとして力学量 $\hat{F}$ の測定問題を考えよう．ψ が $\hat{F}$ の特定の固有関数に等しいという特殊な場合をのぞけば，状態 ψ は力学量 $\hat{F}$ が確定値をもつような運動状態ではない．したがって，この状態で力学量 $\hat{F}$ の測定を行えば，いつも同じ結果が出てくるとはかぎらない．しかし，現実の物理的測定過程が存在すれば，必ずある値が得られるであろう．力学量規定によれば，その値は演算子 $\hat{F}$ の固有値のどれかひとつにかぎるはずであるが——原理的にはどの固有値が現れてもよい．ゆえに，一般的な状態 ψ は $\hat{F}$ のすべての固有状態を運動状態として許すような状態でなければならない．このような状態 ψ は，‘重ね合せ’の原理によれば

$$\psi = \sum_{\nu'} c_{\nu'} u_{\nu'} \qquad (3.2.18)$$

と書かれているはずである．すなわち，力学量 $\hat{F}$ の測定過程が現実に存在するためには，演算子 $\hat{F}$ の固有関数列 $\{u_\nu\}$ は完全性をもたなければならない．完全性の要求はこのような物理的背景から理解することができる．

力学量演算子 $\hat{F}$ が線形であるため固有値方程式(*3.2.14*)は線形同次方程式となるが，これは固有関数 u_ν がいつも定数係数だけ不定であることを意味している．この定数係数は規格化条件 $(u_\nu, u_\nu) = 1$ によって決めることができる．すなわち，u_ν が解であればこれに定数 C_ν をかけた $C_\nu u_\nu$ も解となるので，とくに $|C_\nu| = (u_\nu, u_\nu)^{-1/2}$ とえらんだ $C_\nu u_\nu$ を改めて u_ν とおけば，新しい固有関数 u_ν は規格化条件を満足する．なお，何回も述べたことであるが，定数位相は規格化条件によ

って決められず，不定のまま残る．さて，規格化条件により直交性と完全性は

$$(u_\nu, u_{\nu'}) = \delta_{\nu\nu'}, \tag{3.2.19 a}$$

$$\sum_\nu u_\nu(\boldsymbol{r}) u_\nu{}^*(\boldsymbol{r}') = \delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{3.2.19 b}$$

と書くことができる†．$\delta_{\nu\nu'}$ は Kronecker の δ 記号である．

これまで具体的表示を用いる必要がなかったので，わざと変数を明示しなかったが，(3.2.19 b) では，話をわかりやすくするため，座標表示を用いた．運動量表示 $\tilde{u}_\nu(\boldsymbol{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\int u_\nu(\boldsymbol{r})\exp(-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)\, d^3\boldsymbol{r}$ が使いたければ，$u_\nu \to \tilde{u}_\nu$ および $\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \to \delta^3(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')$ という‘おきかえ’を実行すればよい．全く同じ形の関係式が成立する．もちろん，$(u_\nu, u_{\nu'}) = (\tilde{u}_\nu, \tilde{u}_{\nu'})$ である．なお，(3.2.19) は固有値 λ_ν が離れ離れの値をとる場合を想定して書いたが，連続的な分布をする場合には，Kronecker 記号 $\delta_{\nu\nu'}$ を δ 関数(たとえば，$\delta(\lambda-\lambda')$)，和記号 $\sum_\nu$ を積分(たとえば，$\int d\lambda$) でおきかえる必要がある．これはすでに運動量や位置座標の固有関数について経験したことでもあり (前節 a) (3.1.9) または (3.1.12) 参照)，くわしく説明する必要はないと思う．今後も固有値 λ_ν が離れ離れの値をとるものとして話を進めてゆく．

——固有値が離れ離れの値と連続的な値の両方をとる場合もある．束縛状態と散乱状態を同時にもつハミルトニアンがその一例である．そのような場合は，Kronecker 記号と δ 関数を使いわけたり，和と積分を共存させたりする必要があるが，形式上の難問は何もない．具体的な取り扱いは後で出てくる．

c) 力学量の測定と期待値

さて一般的な状態 ψ における力学量 $\hat{F}$ の測定問題にもどろう．測定前の段階では，一般に，力学量 $\hat{F}$ がどの値をとるかを 100% 確実に予知することはできないのであった．量子力学はただ，状態 ψ における力学量 $\hat{F}$ の測定が値 λ_ν を与えることの確率，すなわち状態 ψ において状態 u_ν を見出すことの確率が $|(u_\nu, \psi)|^2$ に比例すると述べるだけである．しかし，ひとたび測定して力学量 $\hat{F}$ が値 λ_ν をとった事実を確認してしまえば——力学量規定により——測定直後の状態関数が u_ν になっていることを知る．したがって，測定操作により状態関数は $\psi \to u_\nu$ という飛躍をしたわけである．この事態は，位置座標の測定に関連して §2.2 (p. 72)

---

† 完全性条件 (3.2.19 b) については，1次元の場合の条件式 (2.4.46) を導いた議論を参考にせよ．

で議論した測定操作による‘波の収縮’に他ならない．ここでは，一般的な力学量 $\hat{F}$ を対象にして，もう一度量子力学的測定を見直そう．

その前に展開(3.2.18)の係数 c_ν の物理的および数学的役割をしらべておきたい．(3.2.19)を満足する固有関数列 $\{u_\nu\}$ に対しては，直ちに

$$c_\nu = (u_\nu, \psi) \tag{3.2.20}$$

が得られる．ゆえに，係数 c_ν は状態 ψ において力学量 $\hat{F}$ が値 λ_ν をとる事象の確率振幅に他ならない．すなわち，この事象が起こる確率は

$$w_\nu = \frac{|c_\nu|^2}{\sum_\nu |c_\nu|^2} \tag{3.2.21}$$

である．分母は規格化 $\sum_\nu w_\nu = 1$ のためにえらんだ．しかし，

$$(\psi, \psi) = \sum_\nu \sum_{\nu'} c_\nu{}^* c_{\nu'} (u_\nu, u_{\nu'}) = \sum_\nu |c_\nu|^2 \tag{3.2.22}$$

が成立するので，ψ に対する規格化条件 $(\psi, \psi)=1$ は同時に $\sum_\nu |c_\nu|^2=1$ を与え，$|c_\nu|^2$ 自身が規格化された確率 w_ν となる．座標表示および運動量表示の波動関数が(3.1.8)または(3.1.13)によって各力学量演算子の固有関数列による展開係数と説明されていた事実を想起すれば，展開(3.2.18)の係数である確率振幅 $c_\nu = (u_\nu, \psi)$ を‘F表示における波動関数’と呼んでも差支えなかろう．そのとき，(3.2.22)はちょうど(座標表示と運動量表示の間で成立する)Parseval の等式(2.2.26)に匹敵する座標表示と F 表示の間の関係式とみてよい．なお $u_\nu(\boldsymbol{r}) = (\chi_{\boldsymbol{r}}, u_\nu)$ は F 表示から x 表示への変換関数，$\tilde{u}_\nu(\boldsymbol{p}) = (\phi_{\boldsymbol{p}}, u_\nu)$ は F 表示から p 表示への変換関数と説明することができる．

さて理論的予言である確率 $w_\nu = |(u_\nu, \psi)|^2/(\psi, \psi)$ と測定実験の結果との関係を明らかにしておこう．いま，全く同じ状態 ψ にある同じ力学系を多数——N 個用意する．各力学系で同時に力学量 $\hat{F}$ の測定を行った結果，値 λ_ν を得た力学系の数が N_ν であったとしよう．N が十分大きい極限で比 (N_ν/N) は番号 ν によって決まる一定値に近づくはずである．もちろん，$\sum_\nu N_\nu = N$ であるから，$\sum_\nu (N_\nu/N) = 1$ が成立している．量子力学の確率解釈規定は，実験結果であるこの一定値 $\lim_{N\to\infty} (N_\nu/N)$ が理論的予言値 $w_\nu = |(u_\nu, \psi)|^2/(\psi, \psi)$ に等しいと主張する法則である．これは固有値が離れ離れの値をとる場合の話であるが，固有値が密集していたり連続的な分布をする場合は，位置測定のとき(§2.2)のように全領域を有限個の部

分領域にわけて測定実験を行えばよい．いずれの場合も，干渉実験や波動力学第3法則をめぐって繰り返し述べてきた事情の忠実な一般化にすぎないので，これ以上くわしく説明する必要はなかろう．

いま見た実験結果を集計して力学量 $\hat{F}$ がとった値の平均値を求めれば $(\sum_\nu \lambda_\nu N_\nu/N)$ となるが，これは N 大の極限で一定値に近づくはずである．この一定値を $\bar{F}$ と書けば

$$\bar{F} = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_\nu \lambda_\nu N_\nu. \tag{3.2.23}$$

ここで $\lim_{N\to\infty}(N_\nu/N)$ を理論的予言値 w_ν によっておきかえれば，$\bar{F}$ は確率 w_ν が与えられたときの確率論的平均値

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_\nu \lambda_\nu w_\nu = \frac{\sum_\nu \lambda_\nu |c_\nu|^2}{\sum_\nu |c_\nu|^2} \tag{3.2.24}$$

に変身する．$\bar{F}$ が実験結果，$\langle \hat{F} \rangle$ が理論的予言値であるが，確率解釈規定は $\bar{F}=\langle \hat{F} \rangle$ を主張するわけである．$\langle \hat{F} \rangle$ を状態 ψ における力学量 $\hat{F}$ の**期待値**(expectation value)という．'状態 ψ' を強調して $\langle \hat{F} \rangle_\psi$ と書くこともある．期待値のとる値は固有値そのものではない．この事情を理解するため，固有値が λ_1 と λ_2 の2個しかない簡単な場合を考えよう．このとき $\langle \hat{F} \rangle = \lambda_1 w_1 + \lambda_2(1-w_1)$ となるので，w_1 の0から1までの変動に対応して $\langle \hat{F} \rangle$ は λ_2 から λ_1 までを連続的に変化し，固有値と違う値をとることができる．さて，(3.2.19) と (3.2.14) を用いて (3.2.24) 右辺の分子を変形すれば

$$\begin{aligned}
\sum_\nu \lambda_\nu |c_\nu|^2 &= \int\int \psi^*(\boldsymbol{r},t) \sum_\nu \lambda_\nu u_\nu(\boldsymbol{r}) u_\nu^*(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}',t)\, d^3r d^3r' \\
&= \int\int \psi^*(\boldsymbol{r},t) \hat{F}\left(\boldsymbol{r}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right) \left\{\sum_\nu u_\nu(\boldsymbol{r}) u_\nu^*(\boldsymbol{r}')\right\} \psi(\boldsymbol{r}',t)\, d^3r d^3r' \\
&= \int \psi^*(\boldsymbol{r},t) \hat{F}\left(\boldsymbol{r}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right) \psi(\boldsymbol{r},t)\, d^3r \\
&= (\psi, \hat{F}\psi)
\end{aligned}$$

となる．一方，分母は $\sum_\nu |c_\nu|^2 = (\psi, \psi)$ であるから，期待値 (3.2.24) は

$$\langle \hat{F} \rangle = \frac{(\psi, \hat{F}\psi)}{(\psi, \psi)} \tag{3.2.25}$$

と書くことができる．これは座標表示における期待値の式である．$\psi(\boldsymbol{r},t)$ と

$\hat{F}(\boldsymbol{r}, (\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r}))$ を $\tilde{\psi}(\boldsymbol{p}, t)$ と $\hat{F}(i\hbar(\partial/\partial\boldsymbol{p}), \boldsymbol{p})$ でおきかえれば運動量表示の期待値の公式が出てくるが，これは自明であろう．なお，(3.2.24) 自身は F 表示における期待値の式である．いうまでもないが，期待値は表示の変換に対して不変であり，どの表示を用いて計算しても同じ値が得られる．

期待値 $\langle F\rangle$ のまわりの確率論的な分散は

$$(\varDelta F)^2 = \langle(\hat{F}-\langle\hat{F}\rangle)^2\rangle = \langle\hat{F}^2\rangle-\langle\hat{F}\rangle^2 \qquad (3.2.26)$$

で与えられるが，**偏差** $\varDelta F=\sqrt{\langle(\hat{F}-\langle\hat{F}\rangle)^2\rangle}$ は力学量 $\hat{F}$ が状態 ψ においてとる値の‘ばらつき’の目安と考えてよい．さらに，必要に応じて，高次のモーメント $\langle(\hat{F}-\langle\hat{F}\rangle)^m\rangle$ を導入することができる．なお $\psi=u_\nu$ であれば $\langle\hat{F}\rangle=\lambda_\nu$, $\varDelta F=0$ となることは自明であろう．逆に $\varDelta F=0$ は $\langle(\hat{F}-\langle\hat{F}\rangle)^2\rangle=\int|(\hat{F}-\langle\hat{F}\rangle)\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 d^3\boldsymbol{r}=0$ を意味するので，ψ が $\hat{F}\psi=\langle\hat{F}\rangle\psi$ を満足する場合にかぎって偏差ゼロが実現する．ゆえに，偏差ゼロの状態はその力学量演算子の固有状態以外にはない．そのとき期待値は固有値そのものになる．

d) 不確定性関係

次に，状態 ψ における2個の力学量 $\hat{F}$ と $\hat{G}$ の測定問題を考えたい．$\hat{F}$ の固有値問題はいままでどおりとし，$\hat{G}$ は固有値 μ_ρ および固有関数 v_ρ をもつとしよう——すなわち，$\hat{G}v_\rho=\mu_\rho v_\rho$. もちろん，固有関数列 $\{v_\rho\}$ は (3.2.19) と同形の完全正規直交性をもつとする．いうまでもなく，状態 ψ において力学量 $\hat{G}$ が値 μ_ρ をとることの確率は $w_\rho=|(v_\rho, \psi)|^2/(\psi, \psi)$ によって与えられる．さて，同じ状態 ψ にある全く同じ力学系を多数用意し，その半数の力学系で $\hat{F}$ を測定し，残りの力学系で $\hat{G}$ を測定する．実験結果を定石通り集計整理して平均値と偏差を求めれば，それは理論的予言値 $\langle\hat{F}\rangle, \langle\hat{G}\rangle, \varDelta F$ および $\varDelta G$ に等しいはずである．まず，偏差 $\varDelta F=\sqrt{\langle\hat{F}'^2\rangle}$ と $\varDelta G=\sqrt{\langle\hat{G}'^2\rangle}$ が満足すべき一般的関係を求めよう．ただし，$\hat{F}'=\hat{F}-\langle\hat{F}\rangle$ および $\hat{G}'=\hat{G}-\langle\hat{G}\rangle$ とおいた．いま，ξ を実数として関数

$$\psi' = (\xi\hat{F}'+i\hat{G}')\psi$$

を定義すれば，常に成立する不等式 $(\psi', \psi')\geqq 0$ は

$$\xi^2(\varDelta F)^2+\xi\langle i[\hat{F}, \hat{G}]\rangle+(\varDelta G)^2 \geqq 0$$

と書くことができる．ここで，$[\hat{F}', \hat{G}']=[\hat{F}, \hat{G}]$ を用いた．また，$[\hat{F}, \hat{G}]^\dagger=[\hat{G}, \hat{F}]=-[\hat{F}, \hat{G}]$ により，$\langle i[\hat{F}, \hat{G}]\rangle$ は実数であることがわかる．さて，この不等式が実数 ξ の値の如何にかかわらず成立しているのであるから，

$$\langle i[\hat{F},\hat{G}]\rangle^2 - 4(\Delta F)^2(\Delta G)^2 \leqq 0$$

でなければならない．こうして関係式

$$\Delta F \Delta G \geqq \frac{1}{2}|\langle i[\hat{F},\hat{G}]\rangle| \tag{3.2.27}$$

が得られる．この関係式を軸にして，状態 ψ における2個の力学量 $\hat{F}$ と $\hat{G}$ の測定問題を考えようというのである．なお，(3.2.27)の等号は $(\psi',\psi')=0$ の場合，すなわち，次の条件を満足する状態 ψ_0 にかぎって成立する：

$$\left.\begin{aligned} &(\xi_0\hat{F}'+i\hat{G}')\psi_0 = 0 \\ \text{ただし，}\quad &\xi_0 = -\langle i[\hat{F},\hat{G}]\rangle/2(\Delta F)^2 \end{aligned}\right\} \tag{3.2.28}$$

まず，演算子 $\hat{F}$ と $\hat{G}$ が交換可能な場合，すなわち，$[\hat{F},\hat{G}]=0$ の場合を取り上げよう．このとき(3.2.27)は $\Delta F\Delta G \geqq 0$ となり，ΔF と ΔG は何の拘束も受けない．したがって，同時に $\Delta F=0$ および $\Delta G=0$ を与える状態関数が存在しうる．その状態関数は——偏差ゼロの状態がその力学量演算子の固有状態にかぎるという事実を想起すれば——$\hat{F}$ と $\hat{G}$ の同時的固有関数でなければならない．これは，$[\hat{F},\hat{G}]=0$ であれば $\hat{F}$ と $\hat{G}$ の同時的固有値問題

$$\hat{F}u_{\nu\rho} = \lambda_\nu u_{\nu\rho}, \qquad \hat{G}u_{\nu\rho} = \mu_\rho u_{\nu\rho} \tag{3.2.29}$$

が存在するという数学的事実を意味している．実際，$[\hat{F},\hat{G}]=0$ から直接同時的固有関数 $u_{\nu\rho}$ の存在を証明することができる．逆に，同時的固有関数 $u_{\nu\rho}$ の存在から $[\hat{F},\hat{G}]=0$ を証明することも可能である．状態 $\psi=u_{\nu\rho}$ における測定が同時に $\Delta F=\Delta G=0$ を与えることは自明であろう．また，この状態での $\hat{F}$ の測定は必ず値 λ_ν を与えるが，引き続いて直ちに $\hat{G}$ を測定すれば必ず値 μ_ρ が得られるはずである．順序を逆にしても結果は変わらない．$[\hat{F},\hat{G}]=0$ は力学量 $\hat{F}$ と $\hat{G}$ の同時精密測定が原理的に存在しうるための必要十分条件である．

$[\hat{F},\hat{G}]\neq 0$ の場合，(3.2.27)は**不確定性関係**となって ΔF と ΔG の相互関係を拘束する．たとえば，状態関数 ψ を工夫して $\Delta F\to 0$ が実現したとすれば，(3.2.27)により必然的に $\Delta G\to\infty$ となってしまう．逆も同様である．ゆえに，同時に $\Delta F\to 0$ と $\Delta G\to 0$ を実現することは不可能であり，交換可能でない演算子 $\hat{F}$ と $\hat{G}$ によって表される力学量の同時精密測定は原理的に存在しない．これは原理的な不可能性の主張であって，人工的な実験装置につきまとう測定誤差の問題ではない点に注意する必要がある．たとえどのように精密な装置ができたとしても，

不確定性関係の主張する同時精密測定の不可能性を解消することはできない．$[\hat{F},\hat{G}]\neq 0$ の場合には，もちろん，同時的固有状態は存在しないわけであり，$\hat{F}$ の固有状態 u_ν における力学量 $\hat{G}$ の測定値，および $\hat{G}$ の固有状態 v_ρ における力学量 $\hat{F}$ の測定値は完全にばらついてしまう．このような事情は，すでに波束の具体的表現をつくるさい，位置座標と運動量の組に対して経験してきたところである(§2.3b)を見よ)．$\hat{F}$ を $\hat{x}_1=\hat{x}$，$\hat{x}_2=\hat{y}$，$\hat{x}_3=\hat{z}$ とえらび，それぞれに対応して，$\hat{G}$ を $\hat{p}_1=\hat{p}_x$，$\hat{p}_2=\hat{p}_y$，$\hat{p}_3=\hat{p}_z$ とおけば，$[\hat{F},\hat{G}]=i\hbar$ であるから，(3.2.27)は

$$\Delta x_\alpha \Delta p_\alpha \geqq \frac{\hbar}{2} \qquad (\alpha=1,2,3) \tag{3.2.30}$$

となる．x_α と p_α は正準共役な力学変数であるから，正準交換関係(3.1.21)を反映して，不確定性関係がこのような単純な形になったのである．等号が成立して不確定性が極小になるのは――(3.2.28)により――状態関数が方程式

$$\left[\frac{\partial}{\partial x_\alpha}-\frac{i}{\hbar}\langle p_\alpha\rangle+\frac{1}{2(\Delta x_\alpha)^2}(x_\alpha-\langle x_\alpha\rangle)\right]\psi_0(\boldsymbol{r})=0$$

を満足する場合であるが，解を具体的に書けば

$$\psi_0(\boldsymbol{r})=\left[(2\pi)^3\prod_\alpha(\Delta x_\alpha)^2\right]^{-1/4}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\langle \boldsymbol{p}\rangle\cdot\boldsymbol{r}-\sum_\alpha\frac{(x_\alpha-\langle x_\alpha\rangle)^2}{4(\Delta x_\alpha)^2}\right] \tag{3.2.31}$$

となる．係数は規格化条件 $(\psi_0,\psi_0)=1$ によって定めた．不確定性を極小にするという意味で，この $\psi_0(\boldsymbol{r})$ を**極小波束**(minimum wave packet)という．(3.2.31)において $\langle \boldsymbol{p}\rangle$ の方向を z 軸にえらび，すなわち，$\langle \boldsymbol{p}\rangle=(0,0,p)$ とおき，さらに軸対称性 $(\Delta x)^2=(\Delta y)^2=(1/2)(\Delta r)^2$ を導入し，円筒座標 $\boldsymbol{r}=(r,\theta,z)$ を用いて表せば(2.3.23)が得られる．(2.3.23)は極小波束だったので，極小的不確定性関係(2.3.24)が成立したというわけである．ただし，$(\Delta p_x)^2=(\Delta p_y)^2=(1/2)(\Delta p_r)^2$．なお，1次元の場合，調和振動子の基底状態固有関数(2.4.72)は極小波束になっていることがわかる．ただし，$\langle p\rangle=0$，$(\Delta q)^2=(\hbar/2m\omega)$．

不確定性関係(3.2.30)が波動性と密接に結びついていることは具体的波束(2.3.23)を通して理解したとおりであるが，ここではその事実を一般的な波動現象論の立場から眺めておきたい．簡単のため，1次元波動に話をかぎる．波動関数 $\psi(x)$ の平面波展開

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} A(k)\exp(ikx)\,dk \tag{3.2.32}$$

において，$|A(k)|$ が $k=k_0$ を中心に幅 Δk の程度しかひろがっていない場合を想定しよう．すなわち，$|k|\gtrsim *\Delta k$ に対しては $|A(k)|$ はほとんどゼロと見なしてよいとする（$*$ は1の程度の数値係数がつくことを許容する記号として用いた）．このとき(3.2.32)は

$$\psi(x) \cong \exp(ik_0x)\Phi(x),$$

ただし

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-*\Delta k}^{*\Delta k} A(k_0+\xi)\exp(i\xi x)\,d\xi$$

と書くことができる．ゆえに，$\Phi(x)$ の積分表示から，$|x|\ll *(\Delta k)^{-1}$ に対しては $\exp(i\xi x)\cong 1$ と近似できるので $\Phi(x)\cong$定数，$|x|\gg *(\Delta k)^{-1}$ に対しては $\exp(i\xi x)$ がはげしく振動するため $\Phi(x)\cong 0$ となることがわかる．これは $\psi(x)$ がゼロでない値をもつ x 領域の幅 Δx が不確定性関係

$$\Delta x\Delta k \cong 1 \tag{3.2.33}$$

にしたがうことを意味している．すなわち，この意味での不確定性関係は量子力学ばかりでなく波動現象一般の性質なのである．量子力学の場合は $k=(p/\hbar)$ であるから，(3.2.33)は直ちに $\Delta x\Delta p\cong\hbar$ を与える．また，(3.2.32)において空間変数 x を時間変数 t に，波数 k を角振動数 $-\omega$ におきかえれば，(3.2.33)は時間変動幅 Δt と角振動数幅 $\Delta\omega$ に対する不確定性関係

$$\Delta t\Delta\omega \sim 1 \tag{3.2.34}$$

に変身する．量子力学では $\omega=(E/\hbar)$ であるから $\Delta t\Delta E\sim\hbar$ となるが，これはすでに§2.3a)でくわしく議論した(2.3.17)に他ならない．

最後に，波動現象の立場から不確定性関係の内容を明示してくれる思考実験があるので，紹介しておこう．図3.1を見ていただきたい．衝立Sには原点中心に直径 a 程度の穴が開けられている．座標軸は衝立面に含まれる方向に x 軸，衝立面に垂直に下から上を向く方向に y 軸をとることにしよう．粒子がこの穴を通過すれば，$\langle x\rangle\cong 0$ および $\Delta x\cong a$ という位置測定が遂行されたことになる．そこで，x 座標の測定を目的にして，衝立Sの下方から y 軸方向に沿って運動量 p の粒子ビームを送り込んで見る．運動量 p の粒子ビームは波長 $\lambda=(h/p)$ の平面波

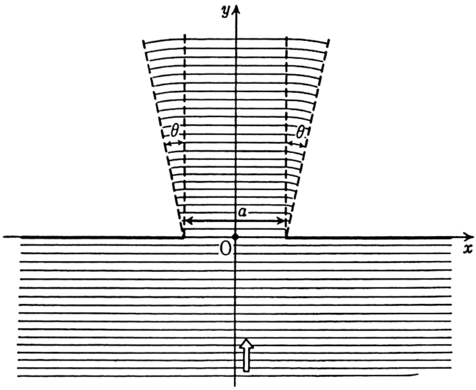


図 3.1 位置測定の思考実験

であるが，穴を通って上方空間に進入するさい波動性のために図のような回折現象をひき起こすことになろう．波長 λ が穴の直径 a より小さい場合，回折角は大よそ $\sin\theta \cong (\lambda/a)$ の程度である．したがって，衝立Sの上方では運動量の x 成分はゼロでない値をもち，$\langle p_x\rangle \cong 0$ を中心に幅 $\Delta p_x \cong {*}p\sin\theta \cong {*}(h/a)$ の程度の分布をもってしまう．$\Delta x \cong a$ を想い出せば，これは直ちに不確定性関係 $\Delta x\Delta p_x \sim h$ を与える．この思考実験は，位置測定の精度をあげようとして穴の大きさを小さくしぼれば——波動性の効果が立ちどころに現れて回折角が大きくなり——運動量の不確定性が増大するという機構を見事に描き出している．

§3.3 量子力学における基本設定

私達は，はじめ粒子と波動の二重性を量子力学の基礎的な実験事実として容認し，その直接的な法則化として波動力学における運動法則——第1，第2，第3法則を設定した．前2節では，時空表示の波動関数に頼る波動力学の枠をはずし，運動量表示やその他の表示を導入するという表現方法の拡張に関連して，一般的な確率解釈規定と力学量規定を導入したのである．いずれも，より広汎な理論体系の建設へ進むための発展であり準備であった．ここでは，波動力学の運動法則にはじまる以上の帰納的発展や数学的準備という足場を一切取り払い，量子力学の理論的骨組を一応完成された体系として提示してみようと思う．

量子力学は下記の基本設定 I，II，III によって構成される理論体系である．

a) 基本設定 I ——状態

(I a)　**量子数の存在**　"力学系の状態を過不足なく完全に指定することのできる一定個数の実数の組—— $a=(a_1, a_2, \cdots, a_n)$ ——が存在する."

この実数の組を**量子数**(quantum number)という．個数 n が力学系の自由度を表す．量子数はただ1組とはかぎらず，原理的には多数存在しうる．たとえば，a の他に $b=(b_1, b_2, \cdots, b_n)$，$c=(c_1, c_2, \cdots, c_n)$，… など．$a, b, c, \cdots$ はそれぞれ n 次元 Euclid 空間 $\mathsf{R}_a, \mathsf{R}_b, \mathsf{R}_c, \cdots$ 内の点である．

状態指定が可能であれば，量子数はどのようにえらんでもよい．しかし，結果を先にいえば，力学量がとる値自身(またはそれを区別する数)を量子数として採用することになる．たとえば，N 個の粒子からなる力学系の場合，各粒子の位置座標がとる値 $a=(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(N)})$ を量子数にえらんでもよいし，運動量の値 $b=(\boldsymbol{p}_{(1)}, \boldsymbol{p}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{p}_{(N)})$ をとることもできる．このとき $n=3N$. 1次元調和振動子の場合(§2.4 e))，$a=q$ または $b=p$ としてよいが，エネルギー固有値 $E_\nu=\hbar\omega(\nu+1/2)$ の番号をとり $c=\nu$ とえらぶこともできる．q と p はふつう連続変数であるが，ν は離れ離れの値 $0, 1, 2, \cdots$ をとる．このように，量子数としては状態指定に便利な力学量のとる値を採用しているが，実は，これ以外に方法がないのである．もしも状態指定に都合のよい量子数があったとすれば，それを固有値としてもつ演算子は必ず特定の力学量を表すことになろう．しかし，ここではまだ力学量規定を導入していない．基本設定IIによってはじめて，力学量の値を状態指定に結びつけることが可能となり，状態指定の形式と内容が整備される．量子力学理論体系の物理的構成にとっては，量子数の存在の方が力学量規定よりも基本的な設定であると考えるべきであろう．

(I b)　**状態関数と確率解釈規定**　"力学系の運動状態は，確率解釈規定の意味において，量子数空間(たとえば R_a) 上で定義された線形関数空間(たとえば H_a) 内の複素数値関数(たとえば $\psi(a)\in\mathsf{H}_a$) によって記述される."確率解釈規定とは"状態 ψ_1(関数 $\psi_1(a)$ によって表される状態)において状態 ψ_2(関数 $\psi_2(a)$ によって表される状態)を見出すことの確率が $|(\psi_2, \psi_1)|^2$ に比例する"ということである．ただし，

$$(\psi_2, \psi_1)=\int \psi_2{}^*(a)\,\psi_1(a)\,\rho(a)\,da. \tag{3.3.1}$$

ここで $\rho(a)$ は R_a の特性に応じてえらばれた重率関数である．a が連続変数であれば $\rho(a)$ は通常 a の連続関数となるが，a が離れ離れの値をとる場合 $\rho(a)$ はたとえば $\sum_\nu \delta(a-a_\nu)$ (δ は n 次元 δ 関数)となって積分は和に変わる．

状態関数がつくる空間(たとえば H_a)に線形性を与えた理由は，いくつかの状態関数の線形結合がふたたび状態関数になるという‘重ね合せ’の原理を数学的に定式化するためである．この線形空間には内積が定義されていなければならない．(3.3.1)の場合，内積 (ψ_2, ψ_1) を表すのに H_a の関数 $\psi_1(a), \psi_2(a)$ を用いた．これを a 表示の状態関数という．表示の選択は原理上全く勝手であるから，別の表示——たとえば b 表示 $\tilde{\psi}_1(b)$ と $\tilde{\psi}_2(b)$ を用いてもよいはずである．しかし，表示の変更によって物理的結果に直結する内積の値が変わってはいけない．すなわち，

$$(\psi_2, \psi_1) = (\tilde{\psi}_2, \tilde{\psi}_1). \tag{3.3.2}$$

ゆえに，表示の変更は内積を不変にする変換，すなわち，ユニタリー変換によって与えられなければならない．なお，‘重ね合せ’の原理はこの変換が線形であることを要求するが，これは自明であろう．

いま，ψ_1 とか ψ_2 とか書き，状態を番号で指定したが，これはあまりに漠然とした表現である．(Ⅰa)によれば状態の正確な指定は量子数の役割である．したがって，状態関数はしばしば $\psi_{a'}(a), \psi_b(a), \cdots$ のように2組の量子数によって特徴づけられることになる．ゆえに，$|(\psi_c, \psi_b)|^2$ は量子数 b によって指定される状態において量子数 c が指定する状態を見出す確率である．いま，a と a' を同じ量子数の異った値とすれば，$\psi_{a'}(a) \propto \delta(a-a')$ (または $\delta_{aa'}$) でなければおかしい．事実，量子数 a がある力学量の値である場合にはこの関係が保証されている．このとき $|(\psi_{a'}, \psi_b)|^2 \propto |\psi_b(a')|^2$ となるから，状態関数 $\psi_b(a')$ は量子数 b によって指定される状態において量子数 a' の状態を見出すことの確率振幅に他ならない．

b) 基本設定 II——力学量

(Ⅱa) **力学量規定** “力学量は次のような意味で完全固有関数列をもつ線形 Hermite 演算子によって表される：その力学量のとる値はその数学的表現である演算子の固有値の内どれか1つにかぎる．力学量が一定の値をとる場合，力学系はその固有値に属する固有関数によって表される状態にある．”

この規定の立場から見れば，状態指定の量子数としては力学量演算子の固有値を採用するのが自然であろう．逆に(Ⅰa)を尊重すれば，状態指定可能の量子数

$a, b, c, \cdots$ があるとき，その量子数をそれぞれの固有値としてもつ力学量演算子 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \cdots$ が存在することを容認するわけである．いずれにしても，量子数 a という状態は力学量 $\hat{A}$ が確定値 a をとる状態のことである．また，a 表示とは力学量演算子 $\hat{A}$ の固有関数列による展開を用いた表示をいう．

いま，各演算子の固有値方程式が $\hat{A}u_a=au_a$，$\hat{B}v_b=bv_b$，$\cdots$ であったとしよう．このとき，状態 v_b の a 表示は $\psi_b(a)=(u_a, v_b)$ となるが，これは(IIa)と(Ib)により‘力学量 $\hat{B}$ が値 b をとる状態において力学量 $\hat{A}$ の測定をしたとき値 a を見出す’ことの確率振幅を与える．また，力学量演算子の Hermite 性により $\psi_{a'}(a)=(u_a, u_{a'})\propto\delta(a-a')$ (または $\delta_{aa'}$)は明らかであろう．(Ib)の説明にさいして現れた2組の量子数によって特徴づけられる状態関数はこのような形で構成される．なお，数学的には $\psi_b(a)$ は b 表示から a 表示への変換関数，$\psi_b{}^*(a)=\psi_a(b)$ は a 表示から b 表示への変換関数を与える．証明は読者に委せよう．

(IIb)　**古典論から量子論への移行規定**　“古典的な正準力学変数 x_α, p_α $(\alpha=1, 2, \cdots, n)$ に相当する量子力学的力学量は正準交換関係

$$\left.\begin{aligned}&[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta]=i\hbar\delta_{\alpha\beta}\\&[\hat{x}_\alpha, \hat{x}_\beta]=0, \qquad [\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta]=0\end{aligned}\right\}\qquad(\alpha, \beta=1, 2, \cdots, n) \tag{3.3.3}$$

を満足する線形 Hermite 演算子 $\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha$ $(\alpha=1, 2, \cdots, n)$ によって表される．”この規定は次のように一般化することができる．“古典的な力学量 F, G に対する関係式は，Poisson 括弧式を

$$\{F, G\}\longrightarrow\frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{G}] \tag{3.3.4}$$

により交換子におきかえれば，量子力学的力学量演算子 $\hat{F}, \hat{G}$ の関係式に移行する．” Planck 定数 $\hbar$ はここではじめて導入されたのである．

通常，力学量は正準力学変数の関数として表されているので，正準力学変数演算子 $\hat{x}_\alpha$ と $\hat{p}_\alpha$ の演算子性さえ確立しておけば，その関数の演算子性は自然に定まる．ゆえに，移行規定としては(3.3.3)だけでよろしい．ただし，演算子関数をつくるさい，Weyl の方法(3.2.17)のような工夫が必要である．

さて，微視的な対象を研究するとき，多くの場合，まず古典論の枠内でモデルをつくりラグランジアン $L(x, \dot{x})$ を構成する．ただし $x=(x_1, x_2, \cdots, x_n)$．これから正準運動量 $p_\alpha=(\partial L/\partial\dot{x}_\alpha)$ $(\alpha=1, 2, \cdots, n)$ を定義し，正準力学変数 x_α, p_α $(\alpha=

$1, 2, \cdots, n$) の関数としてハミルトニアン $H(x_\alpha, p_\alpha)=\sum_\alpha \dot{x}_\alpha p_\alpha - L$ および他の力学量を用意するわけである．正準力学変数が(3. 3. 3)によって量子化されて演算子となれば，ハミルトニアンはじめ各種の力学量も正準力学変数の演算子関数として確定する．(IIb)は古典論から量子論への移行を与える基本設定である．なお，(3. 3. 3)または(3. 3. 4)は直角座標成分以外には直接利用しない方がよい．曲線座標成分に対しては工夫と注意が必要となる．

c) 基本設定 III——時間的発展

(IIIa) **Schrödinger 描像における動力学的法則** "力学系の時間的発展は Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \tag{3.3.5}$$

にしたがう状態関数 ψ の時間的変動によって記述される."

この規定については特別な説明は不要であろう．状態関数が力学系の時間的発展すべてを担うわけであるが，このような記述方式を **Schrödinger 描像** (Schrödinger picture) という．Schrödinger 描像では正準力学変数演算子 $\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha$ ($\alpha=1, 2, \cdots, n$) は時間的には一定である．力学量の期待値 $\langle\hat{F}\rangle=(\psi, \hat{F}\psi)/(\psi, \psi)$ は，一般に，ψ の時間的変動による時間依存性をもつ．

いま，ψ から時間依存性を切り離してみよう．それには，時間的発展を与えるユニタリー演算子 $\hat{U}(t)$ と初期状態関数 ψ_0 を用いて $\psi(t)=\hat{U}(t)\psi_0$ とおけばよい——(3. 2. 2)を見よ．ゆえに，期待値は

$$\langle\hat{F}\rangle = \frac{(\psi_0, \hat{F}(t)\psi_0)}{(\psi_0, \psi_0)} \tag{3.3.6}$$

と書くことができる．ただし，$\hat{F}(t)$ は

$$\hat{F}(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{F}\hat{U}(t) \tag{3.3.7}$$

によって定義された演算子である．この方式では，すべての時間的変動は力学量演算子を通して持ち込まれることになり，状態関数は初期値のまま一定に保たれる．これを **Heisenberg 描像** (Heisenberg picture) という．Heisenberg 描像では，動力学的法則は演算子 $\hat{F}(t)$ の時間的変動を規制するものとして設定されるべきである．(3. 3. 7)を時間変数 t について微分し，(3. 2. 4)とその Hermite 共役式および $\hat{H}$ と $\hat{U}$(または $\hat{U}^\dagger$)との交換可能性を利用すれば，$\hat{F}(t)$ の方程式

として

$$\frac{d\hat{F}(t)}{dt}=\frac{\partial\hat{F}(t)}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[\hat{F}(t),\hat{H}] \tag{3.3.8}$$

が得られる．右辺第1項は $\hat{F}(t)$ の陽的時間依存性についての微分である．(*3.3.8*)を **Heisenberg の運動方程式**という．動力学的法則の表現方式という観点からは，Heisenberg 描像と Schrödinger 描像は全く同格である．したがって，基本設定(III a)は次の(III b)でおきかえられる．

(IIIb)　**Heisenberg 描像における動力学的法則**　“力学系の時間的発展は Heisenberg の運動方程式を満足する力学量演算子の時間的変動によって記述される.”

私達は(IIIa)から出発して(IIIb)に到達したのであるが，逆に(IIIb)からはじめて(IIIa)に進むこともできる．基本設定としては(IIIa)か(IIIb)のどちらか一方をとればよろしい．

古典論との対応を考えよう．初等力学では，通常，力学系の時間的発展は力学量の時間的変動によって記述されている．量子力学の言葉でいえば，‘Heisenberg 描像’に相当する記述方式を用いていたわけである．ゆえに，Poisson 括弧式で表した運動方程式

$$\frac{dF}{dt}=\frac{\partial F}{\partial t}+\{F,H\} \tag{3.3.9}$$

が Heisenberg の運動方程式(*3.3.8*)に対応する．(*3.3.9*)と(*3.3.8*)との対応は決して新しいものではなく，実は，基本設定(II b)によって導入した一般的な量子化規則(*3.3.4*)の1例にすぎない．したがって，Heisenberg の運動方程式——ひいては Schrödinger 方程式も基本設定(II b)の段階ですでに導入済みのものであったということができる．この観点に立って量子力学の理論構成を眺めれば，基本設定 III は全く不要である．しかし，古典論から量子論への移行規定をひとまず除外し，量子力学自体の理論体系を全く新しく構築するという立場に立てば，基本設定 III はもちろん必要である．

——なお，古典力学にも Schrödinger 描像に相当する動力学的法則の記述方式が存在する．それは位相空間分布関数 $f(x,p,t)$ を導入し，運動法則を Liouville の方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\{f, H\}=0 \tag{3.3.10}$$

によって設定する方式である．この場合，正準力学変数 x, p は時間的に一定な独立変数として扱われ，力学量 $F(q, p)$ の平均値 $\langle F\rangle=\int\int F(x, p) f(x, p, t) dxdp$ の時間的変動は位相空間分布関数 f を通して与えられる．

以上が量子力学理論体系の出発点に据えるべき基本設定である．この基本設定は前節までの帰納的発展を論理的に整理したものであるが，決して，数学的な意味での公理体系として量子力学を定式化しようと意図したものではない．数学的に見るならば，基本設定同士の関係や相互依存性の分析を押し進めて，もっと整理された形にまとめあげることもできよう．実際，その仕事はある程度第4章および第16章において行われる予定である．ここで与えた基本設定は，あくまでも，物理的観点から見た整理である．なお，上記の基本設定の他に同種多粒子系を扱う法則を導入しなければならないが，それは§3.5において行う．

§3.4 Heisenberg 描像と行列力学

前節までの話では，私達はほとんど Schrödinger 描像に頼って量子力学を語ってきた．基本設定 III において述べたように，量子力学の動力学的法則の表現としては Heisenberg 描像と Schrödinger 描像とは全く同格である．とくに場の量子論においては Heisenberg 描像が重要な記述方式となる．この節では，Heisenberg 描像の量子力学について簡単な説明を与えると同時に，第1章で述べた Heisenberg の行列力学が量子力学の枠内で導き出されるものであることを示したい．

a) エネルギー固有関数による展開

Heisenberg 描像においても Schrödinger 描像においても，観測と直接結びつくものは期待値(3.3.6)または(3.2.25)である．原理的には，期待値は——ハミルトニアン $\hat{H}$ の固有値問題が解けていれば——$\hat{H}$ の固有値 E_ν と固有関数 u_ν を用いて表すことが可能である．実際，ψ_0 または ψ を関数列 $\{u_\nu\}$ によって展開すれば

$$\psi_0=\sum_\nu c_\nu u_\nu, \qquad \psi=\sum_\nu c_\nu u_\nu \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_\nu t\right)$$

であるから，期待値は

$$\langle \hat{F} \rangle = \sum_{\nu}\sum_{\nu'} c_{\nu}{}^{*} c_{\nu'} (F)_{\nu\nu'} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(E_{\nu}-E_{\nu'})t\right\} \tag{3.4.1}$$

と書くことができる．ただし，

$$(F)_{\nu\nu'} = (u_{\nu}, \hat{F} u_{\nu'}) \tag{3.4.2}$$

とおいた．状態関数は $(\psi, \psi)=(\psi_0, \psi_0)=1$ のように規格化されているものとした．なお，$(F)_{\nu\nu'}$ を $\langle u_{\nu}|\hat{F}|u_{\nu'}\rangle$ または $\langle \nu|\hat{F}|\nu'\rangle$ のように書くこともある．さて，$(F)_{\nu\nu'}$ 全体がつくる行列 (F) は力学量 $\hat{F}$ のひとつの表現――行列表現である．その意味で $(F)_{\nu\nu'}$ を力学量 $\hat{F}$ の**行列要素**(matrix element)という．厳密には，ハミルトニアン $\hat{H}$ を対角化する表示，すなわち，H 表示における $\hat{F}$ の行列要素とよばなければならない(本節 c)を見よ)．演算子 $\hat{F}$ の性質はすべて行列 (F) に反映する．たとえば，$\hat{F}$ の Hermite 性は，$(F)_{\nu'\nu}=(u_{\nu'}, \hat{F}u_{\nu})=(\hat{F}u_{\nu}, u_{\nu'})^{*}=(u_{\nu}, \hat{F}u_{\nu'})^{*}=(F)_{\nu\nu'}{}^{*}$ となって，行列 (F) の Hermite 性を与える――ゆえに(3.4.1)が実数であることを保証する．行列表現は状態関数にも適用することができる．§3.2 c)で説明したように，係数 $c_{\nu}=(u_{\nu}, \psi_0)$ 全体は H 表示の状態関数であるから，c_{ν} を成分とする1列ベクトル

$$(\Psi_0) = \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \end{bmatrix} \tag{3.4.3}$$

を導入し，これを**状態ベクトル**(state vector)とよぶことにしよう．行列表現によれば(3.4.1)は

$$\langle \hat{F} \rangle = (\Psi_0)^{\dagger}(F(t))(\Psi_0) \tag{3.4.4a}$$

$$= (\Psi(t))^{\dagger}(F)(\Psi(t)) \tag{3.4.4b}$$

と書き直すことができる．ただし，$(F(t))$ は

$$(F(t))_{\nu\nu'} = (u_{\nu}, \hat{F}(t) u_{\nu'}) = (F)_{\nu\nu'} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(E_{\nu}-E_{\nu'})t\right\} \tag{3.4.5}$$

を要素とする行列であり，$(\Psi(t))$ は

$$(\Psi(t))_{\nu} = (u_{\nu}, \hat{U}(t)\psi_0) = c_{\nu} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{\nu}t\right) \tag{3.4.6}$$

を成分とする1列ベクトルである．なお，$(\Psi_0)^\dagger$ および $(\Psi(t))^\dagger$ はそれぞれ (Ψ_0) および $(\Psi(t))$ の Hermite 共役行列である1行ベクトルを表す．いうまでもなく，(3.4.4 a) は Heisenberg 描像の式であり，(3.4.4 b) は Schrödinger 描像の式である．H 表示を用いると，Heisenberg 描像の演算子の行列要素 (3.4.5) および Schrödinger 描像の状態ベクトルの成分 (3.4.6) はいつも調和振動的時間依存性をもつことになる．この事実は，第1章で述べた行列力学への道程と密接に関連しており，記憶に留めておく必要がある．

b) Heisenberg の運動方程式

ハミルトニアンの固有値問題が解けていなくとも，Heisenberg 描像の演算子 $\hat{F}(t)$ の時間依存性が既知の演算子の簡単な関数としてわかってさえいれば，期待値 $\langle\hat{F}\rangle$ を求めることができる．しかし，$\hat{F}(t)$ の時間依存性を知るには Heisenberg の運動方程式 (3.3.8) を解かなければならない．この方程式は演算子方程式であり，解く作業はかなり厄介である．Heisenberg の運動方程式の具体的内容は量子力学の展開と応用を通して明らかにしてゆく以外に途はない．ここでは，一般的性質を議論するだけである．

まず，演算子の積のユニタリー変換が各演算子のユニタリー変換の積に等しいことを示そう．演算子を $\hat{A}, \hat{B}, \cdots$ とし，ユニタリー演算子 $\hat{U}$ による変換を考えれば

$$\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{B}\cdots\hat{U} = (\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U})(\hat{U}^\dagger\hat{B}\hat{U})\cdots$$

となるが，これは，ユニタリー性 $\hat{U}\hat{U}^\dagger=1$ から明らかである．演算子関数 $F(\hat{A}, \hat{B}, \cdots)$ は通常 $\hat{A}, \hat{B}, \cdots$ のベキ級数展開で定義されるものであるから，この事実は

$$\hat{U}^\dagger F(\hat{A}, \hat{B}, \cdots)\,\hat{U} = F(\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}, \hat{U}^\dagger\hat{B}\hat{U}, \cdots) \tag{3.4.7}$$

を与えてくれる．$\hat{U}=\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ とえらべば，この変換は Schrödinger 描像から Heisenberg 描像への移行を与える．したがって，正準力学変数 x_α, p_α $(\alpha=1, 2, \cdots, n)$ の関数である力学量 $F(x, p)$ に対して

$$\hat{U}^\dagger(t)\,F(\hat{x}, \hat{p})\,\hat{U}(t) = F(\hat{x}(t), \hat{p}(t)) \tag{3.4.8}$$

が成立する．ただし，

$$\hat{x}_\alpha(t) = \hat{U}^\dagger(t)\,\hat{x}_\alpha\hat{U}(t), \qquad \hat{p}_\alpha(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{p}_\alpha\hat{U}(t) \qquad (\alpha=1, 2, \cdots, n) \tag{3.4.9}$$

は Heisenberg 描像の正準力学変数演算子である．(3.4.8)を正準交換関係(3.4.3)に適用すれば，直ちに，Heisenberg 描像の演算子 $\hat{x}_\alpha(t), \hat{p}_\alpha(t)$ に対する交換関係

$$\left.\begin{array}{l} [\hat{x}_\alpha(t), \hat{p}_\beta(t)] = i\hbar\delta_{\alpha\beta} \\ [\hat{x}_\alpha(t), \hat{x}_\beta(t)] = 0, \quad [\hat{p}_\alpha(t), \hat{p}_\beta(t)] = 0 \end{array}\right\} \quad (\alpha, \beta = 1, 2, \cdots, n) \tag{3.4.10}$$

が得られる．ユニタリー変換にさいしては演算子関係式の形が変わらないところに注意してほしい．一方，ハミルトニアン $\hat{H}$ は，$\hat{H}$ の関数である $\hat{U}(t)$ と可換であるため $\hat{U}^\dagger(t)\hat{H}\hat{U}(t) = \hat{H}$ となり，

$$H(\hat{x}, \hat{p}) = H(\hat{x}(t), \hat{p}(t)) \tag{3.4.11}$$

が成立する．一方，$\hat{H}$ と可換な演算子 $\hat{F}$ は $\hat{U}(t)$ とも可換である．したがって，(3.4.11)の形の関係式 $F(\hat{x}, \hat{p}) = F(\hat{x}(t), \hat{p}(t))$ は一般に $\hat{H}$ と可換な力学量演算子に対して成り立つわけである．これは $\hat{F}(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{F}\hat{U}(t) = F(\hat{x}(t), \hat{p}(t))$ の運動方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{F}(t) = [\hat{F}(t), \hat{H}] = \hat{U}^\dagger(t)[\hat{F}, \hat{H}]\hat{U}(t) = 0 \tag{3.4.12}$$

からも証明することができる．ただし，$\hat{F}$ には正準力学変数を通す以外の陽的時間依存性はないものとした．この場合，(3.4.12)はハミルトニアン $\hat{H}$ と可換な演算子によって表される力学量が運動の恒量であることを示している．

さて，一般の力学量の場合にもどろう．Heisenberg の運動方程式(3.3.8)を具体的な演算子方程式として書くためには，右辺の交換関係を計算しなければならない．その計算は，$\hat{F}$ と $\hat{H}$ が正準力学変数 $\hat{x}, \hat{p}$ の関数として表されていれば，(3.4.10)と(3.4.11)を用いて行うことができる．簡単な例題として，1個の粒子だけからなる力学系をとり，ハミルトニアンが

$$H(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + V(\boldsymbol{r}) \tag{3.4.13}$$

である場合を考えよう．運動方程式(3.3.8)において $\hat{F}(t) = \hat{x}_\alpha(t)$ または $\hat{F}(t) = \hat{p}_\alpha(t)$ とおけば

$$\frac{d}{dt}\hat{x}_\alpha(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{x}_\alpha(t), H(\hat{\boldsymbol{r}}(t), \hat{\boldsymbol{p}}(t))]$$

$$\frac{d}{dt}\hat{p}_\alpha(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_\alpha(t), H(\hat{\boldsymbol{r}}(t), \hat{\boldsymbol{p}}(t))]$$

となる．右辺の交換関係を(*3. 4. 10*)によって計算するわけであるが，これはやさしい．第1式の右辺は

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{x}_\alpha(t), \frac{1}{2m}\sum_{\beta=1}^{3} p_\beta{}^2(t)\right] \\
&= \frac{1}{2i\hbar m}\sum_{\beta=1}^{3}\{[\hat{x}_\alpha(t), \hat{p}_\beta(t)]\hat{p}_\beta(t) + \hat{p}_\beta(t)[\hat{x}_\alpha(t), \hat{p}_\beta(t)]\} \\
&= \frac{1}{m}\hat{p}_\alpha(t)
\end{aligned}$$

となる．一方，第2式右辺は $(i\hbar)^{-1}[\hat{p}_\alpha(t), V(\hat{\boldsymbol{r}}(t))]$ に等しいが，関係式

$$[\hat{p}_\alpha(t), (\hat{x}_\beta(t))^n] = -i\hbar n(\hat{x}_\alpha(t))^{n-1}\delta_{\alpha\beta} \qquad (3.4.14)$$

を用いれば，直ちに

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_\alpha(t), V(\hat{\boldsymbol{r}}(t))] = -\left[\frac{\partial V(\boldsymbol{r})}{\partial x_\alpha}\right]_{\boldsymbol{r}=\hat{\boldsymbol{r}}(t)}$$

となることがわかる．こうして，運動方程式は $\hat{\boldsymbol{r}}(t)$ と $\hat{\boldsymbol{p}}(t)$ に対する演算子方程式

$$\left.\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{r}}(t) &= \frac{1}{m}\hat{\boldsymbol{p}}(t), \\
\frac{d}{dt}\hat{\boldsymbol{p}}(t) &= -\left[\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\right]_{\boldsymbol{r}=\hat{\boldsymbol{r}}(t)}
\end{aligned}\right\} \qquad (3.4.15)$$

を与える．これは正に古典力学における Newton の方程式そのものである．見掛け上，量子力学が消えてしまったような錯覚に陥るが，量子論的性格は交換関係(*3. 4. 10*)の与える演算子性によって堅持されている．普通，力学系の古典的モデルが存在する場合，それに対応する量子論的力学量演算子の満足する運動方程式は古典的な方程式と全く同形になる．

なお，演算子方程式(*3. 4. 15*)(または一般に(*3. 3. 8*))を解くための初期条件はすでにユニタリー変換(*3. 4. 9*)(または一般に(*3. 3. 7*))そのものによって用意されている．すなわち，

$$\hat{x}_\alpha(0) = \hat{x}_\alpha, \qquad \hat{p}_\alpha(0) = \hat{p}_\alpha \qquad (\alpha=1, 2, \cdots, n) \qquad (3.4.16)$$

である．右辺の $\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha$ が Schrödinger 描像の演算子であることはいうまでもな

かろう．

方程式(*3. 4. 15*)の期待値をとれば

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle = \frac{1}{m}\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle, \qquad \frac{d}{dt}\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle = -\left\langle\widehat{\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}}}\right\rangle \tag{3.4.17}$$

となるが，これを Ehrenfest の定理ということがある．この定理には，量子力学成立直後，古典力学との対応関係を示すものとして注目されたという歴史的意義がある．

ハミルトニアン(*2. 4. 61*)によって記述される1次元調和振動子の場合，運動方程式は

$$\frac{d}{dt}\hat{q}(t) = \frac{1}{m}\hat{p}(t), \qquad \frac{d}{dt}\hat{p}(t) = -m\omega^2\hat{q}(t) \tag{3.4.18}$$

となる．初期条件 $\hat{q}(0)=\hat{q}$，$\hat{p}(0)=\hat{p}$ の下で解けば

$$\left.\begin{aligned} \hat{q}(t) &= \hat{q}\cos\omega t+\hat{p}\frac{1}{m\omega}\sin\omega t \\ \hat{p}(t) &= \hat{p}\cos\omega t-\hat{q}m\omega\sin\omega t \end{aligned}\right\} \tag{3.4.19}$$

が得られる．したがって，$\hat{q}(t)$ と $\hat{p}(t)$ または期待値 $\langle\hat{q}(t)\rangle$ と $\langle\hat{p}(t)\rangle$ は古典的な場合と全く同じ時間依存性を示す．調和振動子の場合，運動方程式が線形となるので量子力学と古典力学の相違は見掛け上現れない†．量子論的効果が演算子方程式の解に直接現れる場合は非調和的な力が作用するときである．調和振動子の場合でも，量子論的効果が消滅してしまうわけではなく，位置座標や運動量の分布における不確定性関係を通して現れる．

c) 行列表現の量子力学——行列力学

最後に Heisenberg 描像と密接な関係をもっている行列表現の問題を取り上げる．いま，完全正規直交系 $\{v_\rho\}$ が与えられているとしよう．v_ρ 自身を書き下すためにどの表示を用いてもよいが，便宜上 a 表示を使っておく．いうまでもなく，関数列 $\{v_\rho(a)\}$ は

$$(v_\rho, v_{\rho'}) = \delta_{\rho\rho'}, \qquad \sum_{\rho'} v_{\rho'}(a)v_{\rho'}{}^*(a') = \frac{1}{\rho(a)}\delta(a-a') \tag{3.4.20}$$

という性質をもっている．ただし，$\delta_{\rho\rho'}$ は n 個の指標 ρ と ρ' に対する n 次元

† 力が作用しない自由粒子の場合も同様である．読者自らしらべていただきたい．

Kronecker 記号，$\sum_{\rho}$ は n 重和，$\delta(a-a')$ は n 次元 δ 関数，$\rho(a)$ は R_a 空間の点 a のまわりの微小体積 da がもつ重率である．内積は(3. 3. 1)によって定義されているものとした．この関数列を基準系としてえらび，状態関数や力学量演算子の行列表現をつくろうというわけである．状態関数については明らかであろう：展開

$$\psi=\sum_{\rho}c_{\rho}v_{\rho};\qquad c_{\rho}=(v_{\rho},\psi) \tag{3. 4. 21}$$

の係数 c_{ρ} を集めて(3. 4. 3)の形の 1 列ベクトル (Ψ) を構成すれば，これが状態関数の行列表現になる．力学量演算子 $\hat{F}$ の行列表現をつくるには，$\{v_{\rho}\}$ が完全系をつくるため，要素 v_{ρ} に対する作用を見れば十分である．すなわち，(3. 4. 20) 第 2 式に $\rho(a')\hat{F}v_{\rho}(a')$ をかけて a' について積分し $\hat{F}v_{\rho}$ の展開をつくれば

$$\hat{F}v_{\rho}=\sum_{\rho'}v_{\rho'}(F)_{\rho'\rho};\qquad (F)_{\rho'\rho}=(v_{\rho'},\hat{F}v_{\rho}) \tag{3. 4. 22}$$

となるので，たしかに，展開係数 $(F)_{\rho'\rho}$ を要素とする行列 (F) が演算子 $\hat{F}$ の行列表現であるということができる．一般の状態関数 ψ に対する $\hat{F}$ の作用は

$$\hat{F}\psi=\sum_{\rho'}v_{\rho'}\left\{\sum_{\rho}(F)_{\rho'\rho}c_{\rho}\right\} \tag{3. 4. 23}$$

であるから，1 列ベクトル (Ψ) に対する行列 (F) の積 $(F)(\Psi)$ として表すことができる．演算子 $\hat{F}$ と $\hat{G}$ の和，差および c 数倍を表す演算子 $\alpha\hat{F}+\beta\hat{G}$ (α と β は任意定数)の v_{ρ} に対する作用は

$$(\alpha\hat{F}+\beta\hat{G})v_{\rho}=\sum_{\rho'}v_{\rho'}\{\alpha(F)_{\rho'\rho}+\beta(G)_{\rho'\rho}\} \tag{3. 4. 24}$$

となるから，右辺の展開係数を要素とする行列 $\alpha(F)+\beta(G)$ がその表現である．また，積 $\hat{F}\hat{G}$ に対しては

$$\begin{aligned}\hat{F}\hat{G}v_{\rho}&=\sum_{\rho''}\hat{F}v_{\rho''}(G)_{\rho''\rho}=\sum_{\rho'}v_{\rho'}\left\{\sum_{\rho''}(F)_{\rho'\rho''}(G)_{\rho''\rho}\right\}\\&=\sum_{\rho'}v_{\rho'}((F)(G))_{\rho'\rho}\end{aligned} \tag{3. 4. 25}$$

となり，行列積 $(F)(G)$ が $\hat{F}\hat{G}$ の表現を与える．その他，演算子の Hermite 性やユニタリー性は表現行列の Hermite 性やユニタリー性に反映し，逆演算子は逆行列によって表現される．まとめて書けば，

$$\begin{aligned}&\psi\longleftrightarrow(\Psi),\qquad \hat{F}\longleftrightarrow(F),\qquad \hat{F}\psi\longleftrightarrow(F)(\Psi),\\&\alpha\hat{F}+\beta\hat{G}\longleftrightarrow\alpha(F)+\beta(G),\\&\hat{F}\hat{G}\longleftrightarrow(F)(G),\qquad \hat{F}^{-1}\longleftrightarrow(F)^{-1},\qquad \cdots\end{aligned}$$

などの対応関係が成立したわけである．こうして，すべての関係式が行列表現を用いて表されることになった．

2, 3 補足的な説明をつけ加えておこう．これまでのところ，基準系としてえらんだ関数列 $\{v_\rho\}$ は全く任意であったが，これが力学量演算子 $\hat{F}$ の固有関数である場合，すなわち，

$$\hat{F}v_\rho = \lambda_\rho v_\rho \tag{3.4.26}$$

が成立する場合を想定しよう．このとき，演算子 $\hat{F}$ の行列要素は

$$(F)_{\rho'\rho} = (v_{\rho'}, \hat{F}v_\rho) = \lambda_\rho \delta_{\rho'\rho} \tag{3.4.27}$$

となり，力学量 $\hat{F}$ は対角行列 $(\lambda_\rho\delta_{\rho'\rho})$ によって表される．$\hat{F}$ の固有関数列による表示，すなわち，F 表示のことを‘力学量 $\hat{F}$ を対角化する表示’とよぶのは正にこの性質のためである．

これまでは行列表現を見やすくするため，関数 v_ρ の指標 ρ が離れ離れの値をとるものとして書き下してきた．ρ が連続値をとる場合でも，行列形式そのものは全く同じように成立する．ただし，(3.4.20) の Kronecker 記号 $\delta_{\rho\rho'}$ は n 次元 δ 関数 $\delta(\rho-\rho')$ に，和 $\sum_{\rho'}$ は積分 $\int d\rho'$ におきかえておくなどの工夫が必要である．この場合，行列積 $(F)(G)$ の $(\rho'\rho)$ 要素は

$$((F)(G))_{\rho'\rho} = \int d\rho''(F)_{\rho'\rho''}(G)_{\rho''\rho} \tag{3.4.28}$$

としなければならない．具体例として 1 個の粒子からなる力学系をとり上げよう．力学量 $\hat{\boldsymbol{r}}$ の固有関数列 $\{\chi_{\boldsymbol{r}'}(\boldsymbol{r})\}$ を基準系とする $\boldsymbol{r}$ 表示における行列要素は次のようになる：

$$\left.\begin{aligned}
(\boldsymbol{r})_{\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}''} &= (\chi_{\boldsymbol{r}'}, \hat{\boldsymbol{r}}\chi_{\boldsymbol{r}''}) = \boldsymbol{r}'\delta^3(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'') \\
(\boldsymbol{p})_{\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}''} &= (\chi_{\boldsymbol{r}'}, \hat{\boldsymbol{p}}\chi_{\boldsymbol{r}''}) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}'}\delta^3(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'') \\
(H)_{\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}''} &= (\chi_{\boldsymbol{r}'}, \hat{H}\chi_{\boldsymbol{r}''}) = H\left(\boldsymbol{r}', \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}'}\right)\delta^3(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'') \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots
\end{aligned}\right\} \tag{3.4.29}$$

したがって，$\psi(\boldsymbol{r}') = (\Psi)_{\boldsymbol{r}'}$ を列ベクトル (Ψ) の $\boldsymbol{r}'$ 番目成分と見なせば，

$$
\left.\begin{aligned}
((\boldsymbol{r})(\Psi))_{\boldsymbol{r}'} &= \int d^3\boldsymbol{r}''(\boldsymbol{r})_{\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}''}(\Psi)_{\boldsymbol{r}''} = \boldsymbol{r}'\psi(\boldsymbol{r}') \\
((\boldsymbol{p})(\Psi))_{\boldsymbol{r}'} &= \int d^3\boldsymbol{r}''(\boldsymbol{p})_{\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}''}(\Psi)_{\boldsymbol{r}''} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r}')}{\partial\boldsymbol{r}'} \\
((H)(\Psi))_{\boldsymbol{r}'} &= \int d^3\boldsymbol{r}''(H)_{\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}''}(\Psi)_{\boldsymbol{r}''} = H\left(\boldsymbol{r}', \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}'}\right)\psi(\boldsymbol{r}') \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots
\end{aligned}\right\} \tag{3.4.30}
$$

となる．すなわち，通常の掛け算や微分演算までが行列形式で書き表されたわけである．$\boldsymbol{p}$ 表示の場合も同様：

$$
\left.\begin{aligned}
(\boldsymbol{r})_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}''} &= (\phi_{\boldsymbol{p}'}, \hat{\boldsymbol{r}}\phi_{\boldsymbol{p}''}) = i\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}'}\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'') \\
(\boldsymbol{p})_{\boldsymbol{p}'\boldsymbol{p}''} &= (\phi_{\boldsymbol{p}'}, \hat{\boldsymbol{p}}\phi_{\boldsymbol{p}''}) = \boldsymbol{p}'\delta^3(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'') \\
&\cdots\cdots\cdots\cdots
\end{aligned}\right\} \tag{3.4.31}
$$

このように量子力学の理論体系全体はすべて行列表現を用いて記述できることがわかった．実際，Schrödinger 方程式(3.3.5)は

$$
i\hbar\frac{d}{dt}(\Psi) = (H)(\Psi) \tag{3.4.32}
$$

と書くことができる．基準系として $\{v_\rho\}$ を用いれば，(Ψ) は $c_\rho=(v_\rho, \psi)$ を成分とする 1 列ベクトルであり，(H) は

$$
(H)_{\rho'\rho} = (v_{\rho'}, \hat{H}v_\rho) \tag{3.4.33}
$$

を要素とする行列である．また，正準交換関係(3.3.3)はそのまま行列積に対する交換関係

$$
\left.\begin{aligned}
(x_\alpha)(p_\beta)-(p_\beta)(x_\alpha) &= i\hbar\delta_{\alpha\beta} \\
(x_\alpha)(x_\beta)-(x_\beta)(x_\alpha) &= 0 \\
(p_\alpha)(p_\beta)-(p_\beta)(p_\alpha) &= 0
\end{aligned}\right\} \quad (\alpha, \beta=1, 2, \cdots, n) \tag{3.4.34}
$$

に移行する．Heisenberg の運動方程式(3.3.8)も同形の行列方程式

$$
i\hbar\frac{d}{dt}(F) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(F)+(F)(H)-(H)(F) \tag{3.4.35}
$$

によっておきかえられる．行列表現の場合でも，力学系の時間的発展を担うものは Schrödinger 描像においては状態ベクトル (Ψ) であり，Heisenberg 描像にお

いては力学量行列——たとえば (F) の時間依存性である．

このように理論全体を行列表現で表した場合，Heisenberg 描像をとれば，状態ベクトル (Ψ) を見掛け上追放し力学量行列だけで量子力学を構成することができる．この事実を示そう．まず，期待値(3.3.6)において $\psi_0=v_\rho$ とえらぶ．これは決して一般性を害しない．なぜならば，関数列 $\{v_\rho\}$ のえらび方は全く任意であり，初期状態関数をメンバーとしてもつ関数列は必ずつくることができるからである．このとき，期待値(3.3.6)は

$$\langle \hat{F} \rangle = (F(t))_{\rho\rho} \tag{3.4.36}$$

となり，Heisenberg 描像の力学量行列 $(F(t))$ の ρ 番目対角要素に等しい．ゆえに，行列 $(F(t))$ の時間依存性がわかれば問題は解決する．したがって，すべては Heisenberg の運動方程式(3.4.35)(または元の(3.3.8))を解くことに帰着する．

一方，確率解釈規定によれば‘状態 ψ において状態 φ を見出すこと’の確率は $|(\varphi, \psi)|^2/(\varphi, \varphi)(\psi, \psi)$ に等しいが，実は，この式も期待値の形に書くことができる．まず，状態 φ への**射影演算子**(projection operator) $\hat{P}_\varphi$ を任意関数 ψ に対する作用式

$$\hat{P}_\varphi \psi = \frac{(\varphi, \psi)}{(\varphi, \varphi)} \varphi \tag{3.4.37}$$

によって定義しよう．1粒子の場合，$\boldsymbol{r}$ 表示をとって行列要素を与えれば

$$(P_\varphi)_{\boldsymbol{r}'\boldsymbol{r}''} = (\chi_{\boldsymbol{r}'}, \hat{P}_\varphi \chi_{\boldsymbol{r}''}) = \frac{\varphi(\boldsymbol{r}')\varphi^*(\boldsymbol{r}'')}{(\varphi, \varphi)} \tag{3.4.38}$$

となる．一般の場合は

$$(P_\varphi)_{\rho'\rho''} = (v_{\rho'}, \hat{P}_\varphi v_{\rho''}) = \frac{c_{\rho'} c_{\rho''}^*}{(\varphi, \varphi)} \tag{3.4.39}$$

であるが，$c_\rho = (v_\rho, \varphi)$ は φ を $\{v_\rho\}$ で展開したときの係数に他ならない．さて，定義により

$$\hat{P}_\varphi \varphi = \varphi \tag{3.4.40}$$

となるので，

$$\hat{P}_\varphi{}^2 \psi = \hat{P}_\varphi \psi \qquad \text{または} \qquad \hat{P}_\varphi{}^2 = \hat{P}_\varphi \tag{3.4.41}$$

が成立し，$\hat{P}_\varphi$ はたしかに射影演算子の特性をもっていることがわかる．$\hat{P}_\varphi$ を用いれば，‘状態 ψ において状態 φ を見出すこと’の確率は

$$\langle \hat{P}_\varphi \rangle = \frac{(\psi, \hat{P}_\varphi \psi)}{(\psi, \psi)} \tag{3.4.42}$$

と書くことができる．これは正に期待値形式に他ならない．この見地からすれば，当然，期待値公式を出発点に据えて確率解釈規定と力学量規定を統合した公理論的理論構成が工夫されてもよかろう．

さて，(3.4.42)において力学系の時間的発展を考慮し，$\psi = \hat{U}(t)\psi_0$ とおけば

$$\langle \hat{P}_\varphi \rangle = \frac{(\psi_0, \hat{P}_\varphi(t)\psi_0)}{(\psi_0, \psi_0)} \tag{3.4.43}$$

となるが，これは $\psi_0 \to \varphi$ という遷移に対する遷移確率を与える——(3.1.5)を参照していただきたい．もちろん，$\hat{P}_\varphi(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{P}_\varphi\hat{U}(t)$ とおいた．ここで $\psi_0 = v_\rho$ とえらべば

$$\langle \hat{P}_\varphi \rangle = (P_\varphi(t))_{\rho\rho} \tag{3.4.44}$$

となり，遷移確率も行列 $(P_\varphi(t))$ の ρ 番目対角要素として与えられることになったのである．以上の事実は量子力学を力学量行列だけで構成できることを示している．このような定式化をとくに**行列力学**(matrix mechanics)という．私達は波動力学を導入路として量子力学に到達し，その枠内で行列力学を導いた．一方，Heisenberg は第1章に述べた経路を辿って，波動力学とは独立に，行列力学を創設し量子力学への路を開いたのである†．波動力学と行列力学とは，見掛け上全く違う理論のように見えたが，いまではより広汎な理論体系である量子力学の中で統合されている．

——射影演算子 $\hat{P}_\varphi$ を力学量の言葉で書き直しておこう．状態 φ が力学量 $\hat{F}$ の ρ' 番目の固有状態であるとし $\hat{P}_\varphi = \hat{P}_{\rho'}$ と書けば，$\langle \hat{P}_{\rho'} \rangle$ は‘状態 ψ において力学量 $\hat{F}$ を測定して ρ' 番目固有値 $\lambda_{\rho'}$ が得られること’の確率である．また，$\hat{F}$ の固有値のある部分集合を Δ_F としたとき

$$\hat{P}(\hat{F}; \Delta_F) = \sum_{\lambda_\rho \in \Delta_F} \hat{P}_\rho \tag{3.4.45}$$

はふたたび射影演算子となるが，$\langle \hat{P}(\hat{F}; \Delta_F) \rangle$ は‘状態 ψ における測定にさいして力学量 $\hat{F}$ が Δ_F 内の値をとること’の確率を与えてくれる．(3.4.45)の射影演算子性 $\hat{P}^2 = \hat{P}$ は

$$\hat{P}_\rho \hat{P}_{\rho'} = \hat{P}_\rho \delta_{\rho\rho'} \tag{3.4.46}$$

† 歴史的には Heisenberg の行列力学は遷移確率の合理的導出にまで到達していなかった．

から保証される．この証明は容易である．なお，固有値が連続的な値をとる場合への拡張は自明であろう．

行列力学では，正準力学変数の行列 (x_α), (p_α) $(\alpha=1, 2, \cdots, n)$ を与えるところから問題設定がはじまる．いうまでもなく，各行列要素 $(x_\alpha)_{\nu\nu'}$, $(p_\alpha)_{\nu\nu'}$ $(\alpha=1, 2, \cdots, n)$ は正準交換関係(*3. 4. 34*)を満足するようにえらばれていなければならない．正準力学変数の行列が与えられていれば，一般の力学量 $F(\hat{x}, \hat{p})$ の行列は $(F)=F((x), (p))$ という手続によって求めることができる．しかし，このようにして得られた行列要素がどの力学量を対角化する表示のものか，一般には，わかっていない．行列要素を用いて物理を語るには，表示の意味が確定している必要がある．そこで，特定の力学量 $F(\hat{x}, \hat{p})$ を対角化する表示，すなわち，F 表示に移ることを考えよう．$\hat{F}$ としてハミルトニアン $\hat{H}$ をえらべば，時間的発展の問題を同時に解くことにもなる．さて，行列 $(F)=F((x), (p))$ は Hermite 行列だから，適当なユニタリー行列 (Ω) を用いたユニタリー変換

$$(\bar{F}) = (\Omega)^\dagger (F)(\Omega) \tag{3.4.47}$$

によって対角行列 $(\bar{F})$ をつくることができる．$(\bar{F})$ の対角要素は力学量演算子 $\hat{F}$ の固有値 λ_ρ である．したがって，次のように書くことができる：

$$(\bar{F})_{\rho\rho'} = \lambda_\rho \delta_{\rho\rho'} \tag{3.4.48 a}$$

$$(F)_{\nu\nu'} = \sum_\rho (\Omega)_{\nu\rho} \lambda_\rho (\Omega)^\dagger{}_{\rho\nu'}. \tag{3.4.48 b}$$

ユニタリー行列 (Ω) を見つけるには，代数学の教えるとおり，行列 (F) の固有値問題を解いて規格化された固有ベクトル (v_ρ) を求め，その成分を並べて $(\Omega)_{\nu\rho}=(v_\rho)_\nu$ とおけばよい†．行列 (Ω) がわかれば，F 表示における正準力学変数の行列要素は

$$\left.\begin{aligned}(\bar{x}_\alpha)_{\rho\rho'} &= \sum_\nu \sum_{\nu'} (\Omega)^\dagger{}_{\rho\nu} (x_\alpha)_{\nu\nu'} (\Omega)_{\nu'\rho'} \\ (\bar{p}_\alpha)_{\rho\rho'} &= \sum_\nu \sum_{\nu'} (\Omega)^\dagger{}_{\rho\nu} (p_\alpha)_{\nu\nu'} (\Omega)_{\nu'\rho'}\end{aligned}\right\} \tag{3.4.49}$$

のようにして求めることができる．しかし，一般に代数的な方法で固有値問題を

---

† 1粒子の場合，座標表示を用いれば(*3. 4. 48 b*)は

$$F\left(\boldsymbol{r}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right)\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \sum_\rho v_\rho(\boldsymbol{r})\lambda_\rho v_\rho{}^*(\boldsymbol{r}')$$

となるが，これは記憶に留める価値がある．ただし，$v_\rho(\boldsymbol{r})$ は演算子 $F(\boldsymbol{r}, (\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r}))$ の固有関数である．

解くことは大そうむずかしく，ごくかぎられた少数の問題が解けているにすぎない．次節で，その貴重な例題である調和振動子のエネルギー固有値問題を扱うことにしよう．角運動量の固有値問題も解けるが，それは§5.2で説明する予定である．

§3.5 調和振動子II

1次元調和振動子のエネルギー固有値問題は§2.4e)で解いておいたが，ここではそれを代数的な方法で扱おうというのである．もちろん，ハミルトニアンは(2.4.61)によって与えられている．

この問題の時間的発展もすでに解いてあり，解は(3.4.19)である．いま，この解の三角関数を指数関数によって書き表せば，直ちに関係式

$$\hat{p}(t)\pm im\omega\hat{q}(t) = (\hat{p}\pm im\omega\hat{q})\exp(\pm i\omega t)$$

が得られる．そこで，係数を適当にえらんで演算子

$$\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\hat{p}-im\omega\hat{q}) \tag{3.5.1}$$

を定義すれば，Heisenberg 描像の演算子 $\hat{A}(t)=\exp(i\hat{H}t/\hbar)\hat{A}\exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ は

$$\hat{A}(t) = \hat{A}\exp(-i\omega t) \tag{3.5.2}$$

という時間変動をすることになる．$\hat{A}$ の Hermite 共役演算子 $\hat{A}^{\dagger}=(2m\hbar\omega)^{-1/2}(\hat{p}+im\omega\hat{q})$ に対しては，$\hat{A}^{\dagger}(t)=\exp(i\hat{H}t/\hbar)\hat{A}^{\dagger}\exp(-i\hat{H}t/\hbar)=\hat{A}^{\dagger}\exp(i\omega t)$ となるが，これは自明であろう．なお，正準力学変数を逆に $\hat{A}$ で表せば次のようになる：

$$\hat{q} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{A}-\hat{A}^{\dagger}), \qquad \hat{p} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{A}+\hat{A}^{\dagger}). \tag{3.5.3}$$

a) エネルギー固有値問題

演算子 $\hat{A}$ は調和振動子のエネルギー固有値問題において極めて重要な役割を演じる．まず，正準交換関係が与える演算子関係式

$$\begin{aligned}(\hat{p}\pm im\omega\hat{q})(\hat{p}\mp im\omega\hat{q}) &= \hat{p}^2+m^2\omega^2\hat{q}^2\pm im\omega[\hat{q},\hat{p}] \\ &= \hat{p}^2+m^2\omega^2\hat{q}^2\mp m\hbar\omega\end{aligned}$$

を整理して

$$\hat{A}^\dagger\hat{A} = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} - \frac{1}{2} \tag{3.5.4 a}$$

$$\hat{A}\hat{A}^\dagger = \frac{1}{\hbar\omega}\hat{H} + \frac{1}{2} \tag{3.5.4 b}$$

の形にまとめよう．これから直ちに

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{A}^\dagger\hat{A} + \frac{1}{2}\right) \tag{3.5.5}$$

と交換関係

$$[\hat{A}, \hat{A}^\dagger] = 1 \tag{3.5.6}$$

が出てくる．さらに，(3.5.5)と(3.5.6)を用いて交換関係

$$[\hat{A}, \hat{H}] = \hbar\omega\hat{A}, \tag{3.5.7 a}$$

$$[\hat{A}^\dagger, \hat{H}] = -\hbar\omega\hat{A}^\dagger \tag{3.5.7 b}$$

を証明することができる†．(3.5.7 a)と(3.5.7 b)とが互いに Hermite 共役の関係になっていることは明らかであろう．

さて，私達が解くべき固有値方程式は

$$\hat{H}u = Eu \tag{3.5.8}$$

である．u は固有値 E に属する $\hat{H}$ の固有関数であるが，この u に対して(3.5.7)の両辺を作用させてみよう．(3.5.8)を用いれば，結果を

$$\hat{H}(\hat{A}u) = (E-\hbar\omega)(\hat{A}u) \tag{3.5.9 a}$$

$$\hat{H}(\hat{A}^\dagger u) = (E+\hbar\omega)(\hat{A}^\dagger u) \tag{3.5.9 b}$$

のようにまとめることができる．ゆえに，$\hat{A}u$ と $\hat{A}^\dagger u$ はそれぞれ固有値 $(E-\hbar\omega)$ と $(E+\hbar\omega)$ に属する $\hat{H}$ の固有関数である．$\hat{A}$ または $\hat{A}^\dagger$ を n 回 u に作用させて $\hat{A}^n u$ または $\hat{A}^{\dagger n} u$ をつくれば，これらは固有値 $(E\mp n\hbar\omega)$ に属する固有関数となる．したがって，E が固有値であるとすれば $E+n\hbar\omega$ $(n=0, \pm1, \pm2, \cdots)$ も固有値である．しかし，固有値には下限が存在する．(3.5.4 a)の両辺に対して固有関数 u による期待値をつくれば，$\|\hat{A}u\|^2 = (\hat{A}u, \hat{A}u) = (u, \hat{A}^\dagger\hat{A}u)$ は負にならないという数学的事実が不等式

† この交換関係を使えば，$\hat{A}(t)$ に対する Heisenberg の運動方程式は

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = -i\omega\hat{A}(t)$$

となる．これから直接(3.5.2)を出すことができる．$\hat{A}^\dagger(t)$ についても同様．

$$\left(E-\frac{1}{2}\hbar\omega\right) = \hbar\omega(u, \hat{A}^{\dagger}\hat{A}u) = \hbar\omega\|\hat{A}u\|^2 \geqq 0 \qquad (3.5.10)$$

を与える．ただし，$(u, u)=1$ のように規格化しているものとした．((3.5.4 b) は(3.5.10)よりゆるい条件しか与えないので取上げなくともよい.) この不等式は最低固有値が

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad (3.5.11)$$

であること，および最低固有状態——基底状態が

$$\hat{A}u_0 = 0 \qquad (3.5.12)$$

によって与えられることを意味している．したがって，エネルギー固有値は

$$E_\nu = \hbar\omega\left(\nu+\frac{1}{2}\right) \qquad (\nu=0, 1, 2, \cdots) \qquad (3.5.13)$$

でなければならない．この議論において，(3.5.12)の役割は極めて重要である．なぜならば，u_0 にいくら $\hat{A}$ を作用させても，(3.5.12)のために，(3.5.11)より低いエネルギーに属する固有関数が生まれないからである．これは(3.5.13)が唯一の解であることを示している．もしも，(3.5.13)以外にエネルギー固有値 E' があったとすれば，(3.5.9)を使う議論により $E'+n\hbar\omega$ $(n'=0, \pm1, \pm2, \cdots)$ も固有値となるが，それらに属する固有関数には(3.5.12)を満足するものがないので $E_0=(1/2)\hbar\omega$ よりも低いエネルギー固有状態が存在することになり，不等式(3.5.10)に矛盾する．ゆえに，(3.5.13)以外の固有値はない．当然のことながら，これは§2.4 e)で求めた式(2.4.67)の再現である．

次に，固有値 E_ν に属する固有関数 u_ν の一般形を求めよう．(3.5.9)により

$$u_{\nu-1} = C\hat{A}u_\nu,$$
$$u_{\nu+1} = C'\hat{A}^{\dagger}u_\nu$$

とおくことができる．係数 C, C' は規格化条件 $(u_{\nu\mp1}, u_{\nu\mp1})=(u_\nu, u_\nu)=1$ によって決めるわけであるが，それには(3.5.4), (3.5.8)および(3.5.13)を用いればよい．すなわち，

$$(u_{\nu-1}, u_{\nu-1}) = |C|^2(u_\nu, \hat{A}^{\dagger}\hat{A}u_\nu) = |C|^2\nu$$
$$(u_{\nu+1}, u_{\nu+1}) = |C'|^2(u_\nu, \hat{A}\hat{A}^{\dagger}u_\nu) = |C'|^2(\nu+1)$$

となるので

$$|C|=\frac{1}{\sqrt{\nu}},$$

$$|C'|=\frac{1}{\sqrt{\nu+1}}$$

とすればよろしい(規格化条件で決まるのは絶対値だけであり，定数位相は不定のまま残る)．こうして漸化式

$$\hat{A}u_\nu=\sqrt{\nu}\,u_{\nu-1},\qquad \hat{A}^\dagger u_\nu=\sqrt{\nu+1}u_{\nu+1} \tag{3. 5. 14}$$

を得る．第2式を書き直せば

$$u_\nu=\frac{1}{\sqrt{\nu}}\hat{A}^\dagger u_{\nu-1}=\frac{1}{\sqrt{\nu!}}\hat{A}^{\dagger\nu}u_0 \tag{3. 5. 15}$$

となるが，これは最低固有状態 u_0 を与えて ν 番目固有状態を求める式である．最低固有状態 u_0 を与える式は(3. 5. 12)であるが，座標表示でこれを書けば

$$\frac{du_0(q)}{dq}+\frac{m\omega}{\hbar}qu_0(q)=0 \tag{3. 5. 16}$$

となる．これは簡単な微分方程式だから直ちに解けて，(2. 4. 72 a)が得られる．規格化条件で決めるべき定数因子を除けば，$u_0(q)$ は一義的に定まる．ゆえに，(3. 5. 15)で与えられる u_ν も一義的に定まり，番号 ν を指定すれば u_ν はただひとつしか存在しない．これはエネルギー固有値 E_ν が縮退していないことを示している．さて，ν 番目固有関数を座標表示で書けば

$$u_\nu(q)=\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\frac{1}{\sqrt{\nu!}}\left(\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right)^\nu(\hat{p}+im\omega q)^\nu\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right) \tag{3. 5. 17 a}$$

となる．ただし，$\hat{p}=(\hbar/i)(d/dq)$．この式が(2. 4. 63)に——定数位相を除外すれば——一致することを示そう．そのため，演算子恒等式(3. 2. 12)を用いる．(3. 2. 12)において $\hat{A}=\eta q^2$，$\hat{B}=\hat{p}$ とおけば，$[\hat{A},\hat{B}]=2i\hbar\eta q$，$[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]=0$，… となるから

$$\exp(\eta q^2)\hat{p}\exp(-\eta q^2)=\hat{p}+2i\hbar\eta q$$

が成立する．ゆえに，$\eta=-(m\omega/2\hbar)$ とおけば

$$\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right)(\hat{p}+im\omega q)^\nu\exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right)=\hat{p}^\nu$$

が得られる．したがって，(3. 5. 17 a)は

$$u_\nu(q)=\sqrt{\frac{1}{2^\nu\nu!}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}}\frac{1}{(\sqrt{m\hbar\omega})^\nu}\exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right)$$
$$\cdot\left\{\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right)(\hat{p}+im\omega q)^\nu\exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right)\right\}\exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}q^2\right)$$
$$=i^\nu\sqrt{\frac{1}{2^\nu\nu!}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}q^2\right)\left[(-1)^\nu\exp(\xi^2)\frac{d^\nu}{d\xi^\nu}\exp(-\xi^2)\right]_{\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q} \tag{3.5.17 b}$$

となる．定数位相因子 $i^\nu=\exp(i\nu\pi/2)$ を除けば，(3.5.17 b) はたしかに (2.4.63) そのものである．$|i^\nu|=1$ であるから，この定数位相因子は期待値や遷移確率などの物理的効果をもつ量には何の影響も与えない．しかし，非対角行列要素には $(F)_{\nu\nu'}=i^{\nu'-\nu}(F)_{\nu\nu'}{}'$ の形で姿を見せる．$(F)_{\nu\nu'}{}'$ は (2.4.63) の固有関数列による行列要素である．

ところで，H 表示における力学量演算子の行列要素を求めるだけならば，なにも固有関数の具体形 (3.5.17) を用いる必要はない．正準力学変数の行列要素は (3.5.14) をもとに簡単に求めることができる．まず，演算子 $\hat{A}$ および $\hat{A}^\dagger$ の行列要素を (3.5.14) によって計算すれば

$$\left.\begin{aligned}(\hat{A})_{\nu\nu'}&=(u_\nu,\hat{A}u_{\nu'})=\sqrt{\nu'}\,(u_\nu,u_{\nu'-1})=\sqrt{\nu+1}\,\delta_{\nu,\nu'-1}\\(\hat{A}^\dagger)_{\nu\nu'}&=(u_\nu,\hat{A}^\dagger u_{\nu'})=\sqrt{\nu'+1}\,(u_\nu,u_{\nu'+1})=\sqrt{\nu}\,\delta_{\nu,\nu'+1}\end{aligned}\right\} \tag{3.5.18}$$

となるから，(3.5.3) により

$$\left.\begin{aligned}(q)_{\nu\nu'}&=i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\{\sqrt{\nu+1}\,\delta_{\nu,\nu'-1}-\sqrt{\nu}\,\delta_{\nu,\nu'+1}\}\\(p)_{\nu\nu'}&=\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\{\sqrt{\nu+1}\,\delta_{\nu,\nu'-1}+\sqrt{\nu}\,\delta_{\nu,\nu'+1}\}\end{aligned}\right\} \tag{3.5.19}$$

が得られる．これをもとにして他の力学量演算子の行列要素を計算すればよい．ハミルトニアン $\hat{H}$ の行列要素が対角成分しかないことはいうまでもなかろう：

$$(H)_{\nu\nu'}=\hbar\omega\left(\nu+\frac{1}{2}\right)\delta_{\nu\nu'} \tag{3.5.20}$$

ここで

$$\hat{N}=\hat{A}^\dagger\hat{A}\qquad\text{または}\qquad(N)_{\nu\nu'}=\nu\delta_{\nu\nu'} \tag{3.5.21}$$

という演算子または行列を定義すれば，$\hat{H}=\hbar\omega(\hat{N}+1/2)$ であるから，$\hat{H}$ の対角化問題は実は $\hat{N}$ の対角化問題であった．$\hat{N}$ はちょうど励起状態の番号に対応す

る演算子になっている．第1章で見たように電磁波(および自由場)は無限個の調和振動子の集団に等価であり，量子化すれば，各調和振動子は特定の運動様式をもつ‘場の量子’(電磁場ならば光子)を代表する．その場合，演算子 $\hat{N}$ は特定の運動様式にある‘場の量子’の個数を表す．したがって，$\hat{A}$ は‘場の量子’を1個消す演算子になり，$\hat{A}^\dagger$ は1個生む演算子となる．くわしい議論は第10章“場の量子論”に委せよう．演算子 $\hat{A}$ および $\hat{A}^\dagger$ を用いる方法は素粒子論や物性論など多体系を扱う場合に欠かせない技術になっている．1次元調和振動子のエネルギー固有値問題すなわち定常状態問題はこれで終るが，最後に，N を対角化する表示で各演算子の行列を具体的に書いておこう：

$$(A)=\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{bmatrix}, \qquad (A)^\dagger=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{bmatrix}$$

$$(q)=i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \cdots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{bmatrix}$$

$$(p)=\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{bmatrix}$$

$$(N)=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2 & \\ \vdots & \vdots & & \ddots \end{bmatrix}.$$

なお，これから行列要素 $(q^2)_{\nu\nu'}$ および $(p^2)_{\nu\nu'}$ を求める計算は読者自ら試みていただきたい．対角要素 $(q^2)_{\nu\nu}=(\hbar/2m\omega)(2\nu+1)$ および $(p^2)_{\nu\nu}=(m\hbar\omega/2)(2\nu+1)$ は，それぞれ，ν 番目固有状態における位置と運動量の偏差の2乗を与える．

b）波束の運動

次に波束の運動をしらべよう．すでに指摘したとおり，任意の波束状態 $\psi_0(q)$

における位置と運動量の期待値，すなわち，平均位置と平均運動量 $\langle\hat{q}(t)\rangle, \langle\hat{p}(t)\rangle$ は古典的調和振動子の場合と全く同じように変動する．その場合，初期平均位置 $\langle\hat{q}\rangle$ および初期平均運動量が $\langle\hat{p}\rangle$ 初期条件の役割を果たしているわけである．いま，$\langle\hat{q}\rangle=Q$ および $\langle\hat{p}\rangle=0$ という場合，すなわち，初速度ゼロで初期波束の中心を Q においた場合を想定してみよう．このとき，(3.4.19)は

$$\langle\hat{q}(t)\rangle = Q\cos\omega t, \qquad \langle\hat{p}(t)\rangle = -m\omega Q\sin\omega t \qquad (3.5.22)$$

を与えるが，これは波束の平均位置が原点を中心に振幅 Q，振動数 $(\omega/2\pi)$ の調和振動を行うことを示している．ここまではいつも成立する事柄である．中心ばかりでなく波束が全体として同じ調和振動をする場合があるかどうかしらべてみたい．このような波束はあたかも古典的粒子のように行動する．すなわち，中心位置が(3.5.22)のように振動するだけであり，波形は崩れない．さて，波形を見るひとつの目安が偏差

$$(\varDelta q)_t^{\,2} = \langle(\hat{q}(t))^2\rangle - \langle\hat{q}(t)\rangle^2, \qquad (\varDelta p)_t^{\,2} = \langle(\hat{p}(t))^2\rangle - \langle\hat{p}(t)\rangle^2$$

であるから，まず，この時間的変化を求めよう．(3.3.8)と(3.4.19)によれば

$$\frac{d}{dt}(\hat{q}(t))^2 = \frac{1}{i\hbar}\left[(\hat{q}(t))^2, \frac{1}{2m}(\hat{p}(t))^2\right] = \frac{1}{m}\{\hat{q}(t)\hat{p}(t)+\hat{p}(t)\hat{q}(t)\}$$

$$= \frac{1}{m}\left\{(\hat{q}\hat{p}+\hat{p}\hat{q})\cos 2\omega t + \frac{1}{m\omega}(\hat{p}^2 - m^2\omega^2\hat{q}^2)\sin 2\omega t\right\}$$

$$\frac{d}{dt}(\hat{p}(t))^2 = \frac{1}{i\hbar}\left[(\hat{p}(t))^2, \frac{1}{2}m\omega^2(\hat{q}(t))^2\right] = -m^2\omega^2\frac{d}{dt}(\hat{q}(t))^2$$

となるので，偏差の時間微分は

$$\frac{d}{dt}(\varDelta q)_t^{\,2} = \frac{1}{m}\langle\hat{q}\hat{p}+\hat{p}\hat{q}\rangle\cos 2\omega t + \frac{1}{m^2\omega}\{(\varDelta p)^2 - m^2\omega^2(\varDelta q)^2\}\sin 2\omega t$$

と書くことができる．右辺第1項の期待値は $\langle\hat{p}\rangle=0$ のため $\langle(\hat{q}-Q)\hat{p}+\hat{p}(\hat{q}-Q)\rangle$ に等しいが，さらに $\psi_0=|\psi_0|\exp(i\arg\psi_0)$ を用いれば

$$\langle\hat{q}\hat{p}+\hat{p}\hat{q}\rangle = 2\hbar\int_{-\infty}^{\infty}(q-Q)|\psi_0(q)|^2\frac{d}{dq}(\arg\psi_0(q))\,dq$$

が成立する．そこで，$|\psi_0(q)|^2$ と $(d/dq)\arg\psi_0(q)$ がともに $(q-Q)$ について偶関数である場合に話をかぎろう．q 空間における波束として考えれば，この制限はそれほど厳しいものではない．この場合，$\langle\hat{q}\hat{p}+\hat{p}\hat{q}\rangle=0$ となるから，

$$\frac{d}{dt}(\varDelta q)_t{}^2 = -m^2\omega^2\frac{d}{dt}(\varDelta p)_t{}^2 = \frac{1}{m^2\omega}\{(\varDelta p)^2 - m^2\omega^2(\varDelta q)^2\}\sin 2\omega t \tag{3.5.23}$$

が得られる．ゆえに，$(\varDelta q)_t{}^2$ は初期値 $(\varDelta q)^2$ と $(m\omega)^{-2}(\varDelta p)^2$ の間を振動するが，もしも初期偏差が

$$(\varDelta p)^2 = m^2\omega^2(\varDelta q)^2 \tag{3.5.24}$$

を満足していれば，時間が経過しても偏差 $(\varDelta q)_t{}^2$ および $(\varDelta p)_t{}^2$ は初期値のまま一定に保たれる．(3.5.24) は $\psi_0(q)$ の関数形にかなり厳しい制約を加える．しかしながら，一般に，平均値と偏差だけを与えて関数形を完全に決めることはできない．話を具体的に進めるには，関数形選択の範囲をもっと狭めておく必要がある．いま，私達が求めようとしているものは古典的粒子のように行動する波束であるが，不確定性関係の意味で古典的粒子にもっとも近い波束は§3.2 d) で説明した極小波束である．そこで，$\psi_0(q)$ として1次元極小波束をえらぶことにしよう．極小波束は平均値と偏差を指定することによって完全に決定される．さて，極小波束の場合 $\varDelta p\varDelta q = (\hbar/2)$ が成立するから，条件 (3.5.24) は偏差が $(\varDelta q)^2 = (\hbar/2m\omega)$，$(\varDelta p)^2 = (m\hbar\omega/2)$ であることを要求する．これは ψ_0 が基底状態関数 u_0 と同じ関数形をもつべきことを意味している．ゆえに

$$\psi_0(q) = u_0(q-Q) = \exp(-iQ\hat{p}/\hbar)u_0(q) \tag{3.5.25}$$

を初期状態とする波束は古典的調和振動子と同じように運動する．(ただし，$\exp(-iQ\hat{p}/\hbar) = \exp[-Q(d/dq)]$ は q を $q-Q$ に取り換える作用をする変位演算子である——(3.2.9) 参照.) この事実は (3.5.25) からも直接示すことができる．すなわち，

$$\begin{aligned}\psi(q,t) &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)u_0(q-Q)\\ &= \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Q\hat{p}\right)\exp\left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)u_0(q)\\ &= \exp\left(-i\frac{\omega}{2}t\right)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}Q\hat{p}(-t)\right]u_0(q)\\ &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\left(\frac{\hbar\omega}{2}t - \frac{1}{4}m\omega Q^2\sin 2\omega t + m\omega qQ\sin\omega t\right)\right]u_0(q-Q\cos\omega t).\end{aligned} \tag{3.5.26}$$

ここで，$\hat{p}(-t)=\exp(-i\hat{H}t/\hbar)\hat{p}\exp(i\hat{H}t)=\hat{p}\cos\omega t+m\omega\hat{q}\sin\omega t$ に対しては (3.4.19) を用い，さらに $[\hat{B},\hat{A}]=c$ 数となる場合に成立する公式

$$\exp(\hat{A}+\hat{B})=\exp\left(\frac{1}{2}[\hat{B},\hat{A}]\right)\exp(\hat{A})\exp(\hat{B}) \qquad (3.5.27)^{\dagger}$$

を援用した．$|\psi(q,t)|^2=|u_0(q-Q\cos\omega t)|^2$ が古典的運動をすることは明らかであろう．

——古典的運動を行う波束 (3.5.25) についてもう少し議論しておこう．基底状態関数が条件 $\hat{A}u_0(q)=0$ に従うので ((3.5.12) 参照)，波束関数 $u_0(q-Q)=\exp(-iQ\hat{p}/\hbar)u_0(q)$ は

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Q\hat{p}\right)\hat{A}\exp\left(\frac{i}{\hbar}Q\hat{p}\right)\cdot\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Q\hat{p}\right)u_0(q)$$

$$=\left[\hat{A}+i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}Q\right]u_0(q-Q)=0$$

を満足するはずである．すなわち，波束関数 $u_0(q-Q)$ は演算子 $\hat{A}$ の固有関数になっている．これが極小波束 (3.2.31) 自身の一般的性質であることを示そう．(3.2.28) において $\hat{F}=\hat{x}_\alpha$，$\hat{G}=\hat{p}_\alpha$ とおき，さらに演算子

$$\hat{a}_\alpha=\frac{\hat{p}_\alpha}{2(\Delta p_\alpha)}-i\frac{\hat{x}_\alpha}{2(\Delta x_\alpha)} \qquad (3.5.28)$$

を定義し，極小不確定性関係 $(\Delta x_\alpha)(\Delta p_\alpha)=(\hbar/2)$ を使えば，(3.2.28) は

$$\hat{a}_\alpha\psi_0=\zeta_\alpha\psi_0;\qquad \zeta_\alpha=\langle\hat{a}_\alpha\rangle=\frac{\langle\hat{p}_\alpha\rangle}{2(\Delta p_\alpha)}-i\frac{\langle\hat{x}_\alpha\rangle}{2(\Delta x_\alpha)} \qquad (3.5.29)$$

と書き直すことができる．演算子 $\hat{a}_\alpha$ は交換関係 $[\hat{a}_\alpha,\hat{a}_\beta{}^\dagger]=\delta_{\alpha\beta}$ を満足し，$\hat{N}=\sum_\beta\hat{a}_\beta{}^\dagger\hat{a}_\beta$ に対して $[\hat{a}_\alpha,\hat{N}]=\hat{a}_\alpha$ および $[\hat{a}_\alpha{}^\dagger,\hat{N}]=-\hat{a}_\alpha{}^\dagger$ という関係にあるから，

---

† 証明は次のとおり．$\exp[\lambda(\hat{A}+\hat{B})]=\hat{U}(\lambda)\exp(\lambda\hat{B})$ とおけば $\hat{U}(\lambda)=\exp[\lambda(\hat{A}+\hat{B})]\exp(-\lambda\hat{B})$ であるが，これは次の方程式を満足する：

$$\frac{d\hat{U}(\lambda)}{d\lambda}=\hat{U}(\lambda)\hat{A}(\lambda).$$

ただし，

$$\hat{A}(\lambda)=\exp(\lambda\hat{B})\hat{A}\exp(-\lambda\hat{B})=\hat{A}+\lambda[\hat{B},\hat{A}]+\frac{\lambda^2}{2!}[\hat{B},[\hat{B},\hat{A}]]+\cdots.$$

$[\hat{A}(\lambda),\hat{A}(\lambda')]=0\,(\lambda\neq\lambda')$ ならば，解は $\hat{U}(\lambda)=\exp\left[\int_0^\lambda\hat{A}(\lambda')d\lambda'\right]$ であるから，公式

$$\exp[\lambda(\hat{A}+\hat{B})]=\exp\left(\lambda\hat{A}+\frac{\lambda^2}{2!}[\hat{B},\hat{A}]+\frac{\lambda^3}{3!}[\hat{B},[\hat{B},\hat{A}]]+\cdots\right)\exp(\lambda\hat{B})$$

が得られる．$[\hat{B},\hat{A}]=c$ 数の場合，$\lambda=1$ とおけばこの式は (3.5.27) となる．

$\hat{N}$ を**個数演算子**(number operator)，$\hat{a}_\alpha$ を**消滅演算子**(annihilation operator)，$\hat{a}_\alpha^\dagger$ を**生成演算子**(creation operator)と名付けてもよい．ゆえに，(3.5.29)は極小波束が消滅演算子 $\hat{a}_\alpha$ の固有値 ζ_α に属する固有関数であることを示している†．演算子 $\hat{a}_\alpha$ は Hermite 性をもたないので固有値 ζ_α は一般に複素数値をとる．

最後に，座標表示における時間発展演算子の行列要素

$$\langle q,t|q',t'\rangle=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t')\right]\delta(q-q') \tag{3.5.30}$$

を求めよう $(t>t')$．これは初期条件 $\langle q,t'|q',t'\rangle=\delta(q-q')$ に対応する波動関数だから，時刻 t' で q' にあった粒子を後の時刻 t に q で見出すことの確率振幅である．ゆえに，初期分布 $\psi_0(q)$ に対する波動関数 $\psi(q,t)$ は‘重ね合せ’の原理により

$$\psi(q,t)=\int\langle q,t|q',t'\rangle\psi_0(q')dq' \tag{3.5.31}$$

と書くことができる．これは数学的にも明らかであろう．したがって $\langle q,t|q',t'\rangle$ は時刻 t' の状態から時刻 t の状態をつくる時間発展の変換関数である．さて，$\hat{H}$ の規格化された固有関数列 $\{u_\nu\}$ により，この変換関数は

$$\langle q,t|q',t'\rangle=\sum_\nu u_\nu(q)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}E_\nu(t-t')\right]u_\nu^*(q') \tag{3.5.32}$$

のように展開することができる．以上は一般の場合にも通用する事柄である．1次元調和振動子の場合，E_ν に対して(3.5.13)を，u_ν に対して(3.5.17 b)を使えばよい．すなわち，

$$\begin{aligned}&\langle q,t|q',t'\rangle\\&=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\exp\left[-\frac{i}{2}\omega\Delta t+\frac{\xi^2+\xi'^2}{2}\right]\left\{\sum_\nu\frac{1}{\nu!}\left[\exp(-i\omega\Delta t)\frac{\hat{D}\hat{D}'}{2}\right]^\nu\right\}\exp[-(\xi^2+\xi'^2)]\\&=\sqrt{\frac{m\omega\tau}{\hbar\pi}}\exp\left[\frac{1}{2}(\xi^2+\xi'^2)\right]\left\{\exp\left(\frac{\tau}{2}\hat{D}\hat{D}'\right)\exp\left[-(\xi^2+\xi'^2)\right]\right\}.\end{aligned}$$

ただし，$\Delta t=t-t'$，$\tau=\exp(-i\omega\Delta t)$，$\xi=\sqrt{(m\omega/\hbar)}\,q$，$\xi'=\sqrt{(m\omega/\hbar)}\,q'$，$\hat{D}=(d/d\xi)$，$\hat{D}'=(d/d\xi')$．変位演算子 $\exp(a\hat{D})$ の作用 $\xi\to\xi+a$ を十分活用すれば，$\{\cdots\}$ 内の計算は容易に進む：

† 消滅演算子の固有状態を**コヒーレント状態**(coherent state)とよぶことがあるが，これは振動子の極小波束だったのである．コヒーレント状態は場の量子論や量子光学において重要な役割を演じる．

$$\{\cdots\} = \exp\left[-\left(\xi'+\frac{\tau}{2}\hat{D}\right)^2\right]\exp(-\xi^2)$$

$$= \exp(-\xi'^2)\exp\left(-\frac{\tau^2}{4}\hat{D}^2\right)\exp[-(\xi-\tau\xi')^2]$$

$$= \exp(-\xi'^2)\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(\frac{\tau^2}{4}k^2\right)\exp\left[ik(\xi-\tau\xi')-\frac{1}{4}k^2\right]dk$$

$$= \frac{1}{\sqrt{1-\tau^2}}\exp(-\xi'^2)\exp\left[-\frac{(\xi-\tau\xi')^2}{(1-\tau^2)}\right].$$

このようにして次式が得られる：

$$\langle q,t|q',t'\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega\Delta t)}}\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin(\omega\Delta t)}[(q^2+q'^2)\cos(\omega\Delta t)-2qq']\right\} \tag{3.5.33}$$

これを(3.5.31)で使えば，任意の初期条件に対応する波動関数を求めることができる．たとえば，$\psi_0(q')=u_0(q'-Q)$ に対して(3.5.31)と(3.5.33)は(3.5.26)を再現するが，具体的計算は読者に委せよう．

§3.6 多粒子系

§3.3で設定した量子力学の基本的な理論体系は，もちろん，多粒子系にも適用できる．N個の粒子からなる力学系の状態は，座標表示を用いると，波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}_{(1)},\boldsymbol{r}_{(2)},\cdots,\boldsymbol{r}_{(N)},t)$ によって記述されるが，これは各粒子が $\boldsymbol{r}_{(1)},\boldsymbol{r}_{(2)},\cdots,\boldsymbol{r}_{(N)}$ で見出されることの確率振幅である．すなわち，$|\psi(\boldsymbol{r}_{(1)},\boldsymbol{r}_{(2)},\cdots,\boldsymbol{r}_{(N)},t)|^2d^3\boldsymbol{r}_{(1)}d^3\boldsymbol{r}_{(2)}\cdots d^3\boldsymbol{r}_{(N)}$ は時刻 t のとき1番目粒子を $\boldsymbol{r}_{(1)}$ のまわりの微小領域 $d^3\boldsymbol{r}_{(1)}$ 中に，2番目粒子を $\boldsymbol{r}_{(2)}$ のまわりの微小領域 $d^3\boldsymbol{r}_{(2)}$ 中に，…，N番目粒子を $\boldsymbol{r}_{(N)}$ のまわりの微小領域 $d^3\boldsymbol{r}_{(N)}$ 中に見出すことの確率を与える．通常，

$$\int\cdots\int|\psi(\boldsymbol{r}_{(1)},\boldsymbol{r}_{(2)},\cdots,\boldsymbol{r}_{(N)},t)|^2d^3\boldsymbol{r}_{(1)}d^3\boldsymbol{r}_{(2)}\cdots d^3\boldsymbol{r}_{(N)} = 1 \tag{3.6.1}$$

のように規格化される．また，Fourier変換

$$A(\boldsymbol{p}_{(1)},\boldsymbol{p}_{(2)},\cdots,\boldsymbol{p}_{(N)},t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^{3N}}}\int\cdots\int\psi(\boldsymbol{r}_{(1)},\boldsymbol{r}_{(2)},\cdots,\boldsymbol{r}_{(N)},t)$$
$$\cdot\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{p}_{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{(i)}\right]d^3\boldsymbol{r}_{(1)}d^3\boldsymbol{r}_{(2)}\cdots d^3\boldsymbol{r}_{(N)}$$

は各粒子が運動量 $\boldsymbol{p}_{(1)}, \boldsymbol{p}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{p}_{(N)}$ をもつことの確率振幅であることはいうまでもなかろう．ハミルトニアンが $H(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(N)}, \boldsymbol{p}_{(1)}, \boldsymbol{p}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{p}_{(N)})$ であるような力学系の時間的発展は，この関数において $\boldsymbol{p}_{(i)}$ を $\hat{\boldsymbol{p}}_{(i)}=(\hbar/i)(\partial/\partial\boldsymbol{r}_{(i)})$ におきかえて得られる演算子 $\hat{H}$ をもつ Schrödinger 方程式によって記述される．この場合，Schrödinger 描像と座標表示を用いていることは明らかであろう．Heisenberg 描像や他の表示に移るには所定の手続にしたがえばよい．

以上の事柄は‘基本設定’をただ多粒子系に当てはめただけであり，多粒子系特有の法則というほどのものではない．多粒子系特有の新しい法則は同種粒子がつくる力学系において現れる．簡単のため，同種粒子2個からなる力学系を取り上げ，この新法則を追究しよう．いま，この系の状態が波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, t)$ によって記述されているとすれば，1番目粒子が状態 u_{ν_1} に，2番目粒子が状態 u_{ν_2} にあることの確率振幅は

$$C(\nu_1, \nu_2, t) = \int\int u_{\nu_1}^*(\boldsymbol{r}) u_{\nu_2}^*(\boldsymbol{r}') \psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) d^3\boldsymbol{r} d^3\boldsymbol{r}' \qquad (3.6.2)$$

で与えられる．ただし，$\{u_\nu(\boldsymbol{r})\}$ は完全正規直交系であるとしよう．したがって，$C(\nu_1, \nu_2, t)$ は $\psi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, t)$ を関数列 $\{u_{\nu_1}(\boldsymbol{r}_{(1)}) u_{\nu_2}(\boldsymbol{r}_{(2)})\}$ で展開したときの係数に他ならない．さて，微視的な同種粒子を相手にする場合，1番目とか2番目とか番号を付して区別することは不可能である．これを‘事実’として容認することから同種粒子系に対する新法則が生まれる．この‘事実’によれば――仮りに番号を付したとしても――‘1番目粒子が状態 u_{ν_1} にあり2番目粒子が状態 u_{ν_2} にある’場合と‘1番目粒子が状態 u_{ν_2} にあり2番目粒子が状態 u_{ν_1} にある’場合とを区別することが原理的にできない．したがって，$C(\nu_1, \nu_2, t)$ と $C(\nu_2, \nu_1, t)$ とは本質的に同じ状態を見出すことの確率振幅であるから，両者の相違は絶対値1の定数因子以外にはありえない．すなわち，$C(\nu_1, \nu_2, t)=\varepsilon C(\nu_2, \nu_1, t)$ である(ただし，$|\varepsilon|=1$)．状態番号 ν_1, ν_2 の指定は任意だから $C(\nu_2, \nu_1, t)=\varepsilon C(\nu_1, \nu_2, t)$ も成立しなければならない．ゆえに，$\varepsilon^2=1$ すなわち $\varepsilon=\pm 1$ が得られる．こうして

$$C(\nu_1, \nu_2, t) = \pm C(\nu_2, \nu_1, t) \qquad (3.6.3\,a)$$

が成立すべきことを知る．関数列 $\{u_\nu\}$ の完全性条件を用いれば，(3.6.3 a)から

$$\psi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, t) = \pm\psi(\boldsymbol{r}_{(2)}, \boldsymbol{r}_{(1)}, t) \qquad (3.6.3\,b)$$

を容易に導くことができる．座標表示の波動関数も確率振幅の一種だから，これ

は当然の結果であろう．(3.6.3)が同種粒子系に対する新法則である．すなわち，

“同種粒子系の波動関数(または確率振幅)は粒子座標(または各粒子の状態指定量子数)について対称であるか，または，反対称であるかのいずれかでなければならない．”

波動関数の対称性または反対称性は粒子固有の性質として，いつも定まっており，時間の経過によって決して交替することはない．この事情を見るため，互換演算子 $\hat{P}_{12}$ を導入しよう．これは

$$\hat{P}_{12}\psi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, t) = \psi(\boldsymbol{r}_{(2)}, \boldsymbol{r}_{(1)}, t) \tag{3.6.4}$$

によって定義される．この演算子は $\hat{P}_{12}{}^2=1$ という性質をもつ線形 Hermite 演算子である．ゆえに固有値 ±1 をもつが，対称関数はすべて +1 に属する $\hat{P}_{12}$ の固有関数であり，反対称関数全体は −1 に属する $\hat{P}_{12}$ の固有関数になっている．なお，逆演算子が存在し $\hat{P}_{12}{}^{-1}=\hat{P}_{12}$ であることは自明であろう．さて，$\hat{P}_{12}\hat{H}\psi$ は $\hat{H}\psi$ 中の 1 番目粒子変数と 2 番目粒子変数とを交換することによって得られる関数である．一方，$\hat{P}_{12}\hat{H}\psi=(\hat{P}_{12}\hat{H}\hat{P}_{12}{}^{-1})(\hat{P}_{12}\psi)$ において $\hat{P}_{12}\psi$ は ψ 中の粒子変数を取り換えたものであるから，$\hat{H}'=\hat{P}_{12}\hat{H}\hat{P}_{12}{}^{-1}$ は $\hat{H}$ において粒子変数を交換した演算子である．ところで，同種粒子系のハミルトニアンは粒子番号について対称になっているはずである——もしも対称でなければ，同種粒子が区別できることになってしまう．ゆえに $\hat{H}=\hat{P}_{12}\hat{H}\hat{P}_{12}{}^{-1}$ または $\hat{P}_{12}\hat{H}=\hat{H}\hat{P}_{12}$ が成立し，$\hat{H}$ と $\hat{P}_{12}$ とは交換可能である．したがって，時間発展 $\psi=\exp(-i\hat{H}t/\hbar)\psi_0$ に対して

$$\hat{P}_{12}\psi = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)\hat{P}_{12}\psi_0$$

が成り立ち，初期時刻における波動関数の対称性・反対称性 ($\hat{P}_{12}\psi_0=\pm\psi_0$) はその後も永久に保たれる．こうして，波動関数の対称性・反対称性が粒子の種類に固有の性質であることを知った．

さて，波動関数の対称性・反対称性の物理的内容をしらべよう．まず，反対称の場合を考える．確率振幅 $C(\nu_1, \nu_2, t)$ において $\nu_1=\nu_2$ とおけば，反対称性から直ちに $C(\nu_1, \nu_1, t)=0$ が得られる．したがって，反対称波動関数によって記述される種類の粒子 2 個がひとつの状態 ν_1 にあることの確率はゼロとなる．座標表示の波動関数自身についても同様の性質 $\psi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t)=0$ があり，2 個の粒子が同じ位

置を占有することは許されない．一方，対称な波動関数によって記述される種類の粒子にはこのような事態は起こらず，2個の粒子が同時に同じ状態または同じ位置を占めることができる．

簡単のため，粒子状態が a と b という2個しかない場合を考えよう．反対称の場合，$C(a,a,t)=C(b,b,t)=0$，$C(a,b,t)=-C(b,a,t)\neq 0$ であるから，2個の粒子の一方が状態 a に他方が状態 b にあるというただ1通りの状態しか許されない．対称の場合，$C(a,b,t)=C(b,a,t)\neq 0$，$C(a,a,t)\neq 0$，$C(b,b,t)\neq 0$ であるから，2個の粒子の一方が状態 a に他方が状態 b にあるという状態，双方が共に状態 a にあるという状態，および双方が共に状態 b にあるという状態の3通りが可能となる．反対称性をもつ粒子と対称性をもつ粒子の集団状況にはこのような著しい相違が存在する．しかし，いずれの粒子も区別可能な古典的粒子の集団状況とは明らかに違う．区別可能な粒子の場合，2個の粒子の一方が状態 a にあり他方が状態 b にある状態と両者を交換した状態とは別の状態として区別しなければならないので，両者が共に状態 a にある状態および共に状態 b にある状態とあわせて，合計4通りの異なった状態が出現する．区別不可能という微視的粒子の性質は波動関数の対称性・反対称性に反映し，古典論では想像もできなかったような特異な集団状況を産み出すのである．

以上述べた事柄は，もちろん，2個の場合だけの特殊な性質ではない．この種の特異な集団状況は多数個の同種粒子系において見られる一般的な性質である．同種粒子系は，その波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}_{(1)}, \boldsymbol{r}_{(2)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(N)}, t)$ が任意の2個の粒子座標 $\boldsymbol{r}_{(i)}$ と $\boldsymbol{r}_{(j)}$ の交換に対して，符号を変えるもの $\psi(\cdots, \boldsymbol{r}_{(i)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(j)}, \cdots)=-\psi(\cdots, \boldsymbol{r}_{(j)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(i)}, \cdots)$ と符号を変えないもの $\psi(\cdots, \boldsymbol{r}_{(i)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(j)}, \cdots)=\psi(\cdots, \boldsymbol{r}_{(j)}, \cdots, \boldsymbol{r}_{(i)}, \cdots)$ とに分類することができる．この性質は粒子の種類に固有のものであり，前者の性質をもつ粒子を**Fermi 粒子**または**フェルミオン**(fermion)とよび，後者の性質をもつ粒子を**Bose 粒子**または**ボソン**(boson)とよぶ．フェルミオンはひとつの状態に1個の粒子しか入れないが，ボソンはひとつの状態に何個でも入れる．ゆえに，フェルミオンはFermi-Diracの統計にしたがい，ボソンはBose-Einsteinの統計にしたがう．フェルミオンの例としては，電子，陽子，中性子，μ 中間子，中性微子などの素粒子や質量数が奇数の原子核などがある．これらの粒子はいずれもスピン角運動量がPlanck 定数 $\hbar$ の半奇数倍という値をとる．ボソンの例と

しては，光子，π 中間子などの素粒子や質量数が偶数の原子核などが知られており，これらのスピン角運動量は $\hbar$ の整数倍に等しい(スピン角運動量については第5章を見よ)．スピンと統計についてのこの関係は相対論的な場の量子論によってはじめて合理的な説明が与えられる．多粒子系についてのくわしい説明は第9章および他の巻にゆずろう．

§3.7 古典論への回帰

いままで機会あるごとに，量子力学が古典力学を内包した発展であること，そして，Planck 定数 $\hbar$ をゼロと見なしても差支えない状況の下では量子力学が古典力学に帰ることを強調してきた．量子力学の理論体系が一応構成されたこの段階で，量子力学から古典力学への接近を明確な形で定式化しておく必要があろう．

§3.3における基本設定(IIb)(*3.3.4*)によって，私達は古典力学から量子力学へ移行する方式を確立した．それは，古典力学における力学量 F と G の Poisson 括弧式 $\{F, G\}$ を量子力学における力学量演算子の交換子 $(i\hbar)^{-1}[\hat{F}, \hat{G}]$ によっておきかえることであった．したがって，量子力学から古典力学への回帰は，この移行を逆に辿る過程として

$$\lim_{\hbar\to 0}\frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{G}] = \{F, G\} \qquad (3.7.1)$$

を証明すれば完成する．まず，これを示そう．

便宜上，座標表示を用いる．位置座標 $x_1=x_{(1)}$, $x_2=y_{(1)}$, $x_3=z_{(1)}$, $\cdots$, $x_{n-2}=x_{(N)}$, $x_{n-1}=y_{(N)}$, $x_n=z_{(N)}$ $(n=3N)$ および時間 t の関数である波動関数 $\psi(x_1, x_2, \cdots, x_n, t)$ を

$$\psi = |\psi| \exp\left(\frac{i}{\hbar}W\right) \qquad (3.7.2)$$

とおいて，運動量演算子 $\hat{p}_j=(\hbar/i)(\partial/\partial x_j)$ $(j=1, 2, \cdots, n)$ の効果をしらべる必要がある．位相関数 W はもちろん実数である．第1章で見たように Schrödinger が波動方程式を導くとき，古典力学における作用関数を波動力学における波動関数の位相に対応させたことを想起すれば，

$$p_j = \frac{\partial W}{\partial x_j} \qquad (j=1, 2, \cdots, n) \qquad (3.7.3)$$

によって定義される量が $\hbar\to 0$ の極限で古典力学の運動量に移行するものであることが予想されよう．量子力学的な運動量期待値は $|\psi|$ に対する境界条件を考慮すれば

$$\langle \hat{p}_j\rangle = (\psi, \hat{p}_j\psi) = \int\cdots\int\left\{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial x_j}|\psi|^2 + p_j|\psi|^2\right\}dx_1\cdots dx_n$$
$$= \int\cdots\int p_j|\psi|^2 dx_1\cdots dx_n \qquad (j=1, 2, \cdots, n)$$

となるが，これは $|\psi|^2$ を重率とする関数 p_i(3.7.3)の平均値である．いま，量子力学的波束が §2.1 または §2.3b)で述べたような‘古典的運動’を行う場合を考えよう．そのとき，巨視的尺度においては，振幅関数 $|\psi|$ はほとんど点状分布と考えてよいので，上式の右辺は波束の中心点における関数 p_j の値によって近似することができ，その値が‘古典的運動’の運動量として観測されるはずである．一方，微視的尺度においては，振幅関数 $|\psi|$ は de Broglie 波長に比べて十分大きな領域にわたってひろがり，しかも，極めてゆっくり変化する関数になっていなければならない．したがって，‘古典的運動’を行っている場合，$|\psi|$ の空間微分は極めて小さい値をとることになろう．

このような状況を念頭におきながら，波動関数 ψ に対する演算子 $\hat{p}_j$ の効果を求める．簡単な計算により，まず

$$\left.\begin{aligned} (\hat{p}_j - p_j)\psi &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)w_j^{(1)}\psi \\ w_j^{(1)} &= \frac{\partial}{\partial x_j}\log|\psi| \end{aligned}\right\} \qquad (3.7.4a)$$

が得られる．さらに次式を導くことは容易である：

$$\left.\begin{aligned} (\hat{p}_j - p_j)(\hat{p}_l - p_l)\psi &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 w_{jl}^{(2)}\psi \\ w_{jl}^{(2)} &= \frac{\partial w_l^{(1)}}{\partial x_j} + w_j^{(1)}w_l^{(1)}. \end{aligned}\right\} \qquad (3.7.4b)$$

一般に $(\hat{p}_j - p_j)$ 型演算子の n 個の積については次の通り：

$$\left.\begin{aligned} (\hat{p}_j - p_j)(\hat{p}_l - p_l)\cdots(\hat{p}_r - p_r)\psi &= \left(\frac{\hbar}{i}\right)^n w_{jl\cdots r}^{(n)}\psi \\ w_{jl\cdots r}^{(n)} &= \frac{\partial w_{l\cdots r}^{(n-1)}}{\partial x_j} + w_j^{(1)}w_{l\cdots r}^{(n-1)}. \end{aligned}\right\} \qquad (3.7.4c)$$

前述のような‘古典的運動’が実現する状況では，$w_j{}^{(1)}, w_{jl}{}^{(2)}, \cdots$ が極めて小さな値をとるので，(3.7.4) の各式の右辺は無視してよろしい．これは $\hbar\to 0$ として右辺を無視することと全く同等であり，たしかに古典論への回帰を与える条件となる．このとき，量子力学的力学量演算子 $\hat{p}_j\,(j=1,2,\cdots,n)$ の波動関数に対する効果は，単に，c 数関数 p_j をかける演算しか生まない．ゆえに，運動量演算子の任意の関数に対して

$$F(\hat{p}_1, \hat{p}_2, \cdots)\psi = F(p_1, p_2, \cdots)\psi + O(\hbar) \tag{3.7.5}$$

が成立する．たしかに，p_j は古典的運動量と考えることができる．

さて，古典的力学量と量子力学的力学量演算子との対応が Weyl の方法(§3.2 の (3.2.17) を見よ)によって定式化されているものとしよう．すなわち，古典的力学量 F および G の Fourier 分解

$$\left.\begin{aligned}
&F(x_1, \cdots, x_n, p_1, \cdots, p_n)\\
&\quad = \int\cdots\int \tilde{F}(\xi_1, \cdots, \xi_n, \eta_1, \cdots, \eta_n)\exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l x_l + \eta_l p_l)\right]\\
&\qquad\qquad \cdot d\xi_1\cdots d\xi_n d\eta_1\cdots d\eta_n\\
&G(x_1, \cdots, x_n, p_1, \cdots, p_n)\\
&\quad = \int\cdots\int \tilde{G}(\xi_1', \cdots, \xi_n', \eta_1', \cdots, \eta_n')\exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l' x_l + \eta_l' p_l)\right]\\
&\qquad\qquad \cdot d\xi_1'\cdots d\xi_n' d\eta_1'\cdots d\eta_n'
\end{aligned}\right\} \tag{3.7.6}$$

によって Fourier 成分 $\tilde{F}$ および $\tilde{G}$ が与えられていれば，F および G に対応する量子力学的力学量演算子 $\hat{F}$ および $\hat{G}$ は

$$\left.\begin{aligned}
&F(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_n, \hat{p}_1, \cdots, \hat{p}_n)\\
&\quad = \int\cdots\int \tilde{F}(\xi_1, \cdots, \xi_n, \eta_1, \cdots, \eta_n)\exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l \hat{x}_l + \eta_l \hat{p}_l)\right]\\
&\qquad\qquad \cdot d\xi_1\cdots d\xi_n d\eta_1\cdots d\eta_n\\
&G(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_n, \hat{p}_1, \cdots, \hat{p}_n)\\
&\quad = \int\cdots\int \tilde{G}(\xi_1', \cdots, \xi_n', \eta_1', \cdots, \eta_n')\exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l' \hat{x}_l + \eta_l' \hat{p}_l)\right]\\
&\qquad\qquad \cdot d\xi_1'\cdots d\xi_n' d\eta_1'\cdots d\eta_n'
\end{aligned}\right\} \tag{3.7.7}$$

であると定義される．そこで，まず (3.7.6) を用いて古典的な Poisson 括弧式の

Fourier 分解を求めておこう：

$$\{F, G\} = \sum_{j=1}^{n}\left\{\frac{\partial F}{\partial x_j}\frac{\partial G}{\partial p_j} - \frac{\partial F}{\partial p_j}\frac{\partial G}{\partial x_j}\right\}$$
$$= \int\cdots\int F(\xi_1, \cdots, \eta_1, \cdots)\tilde{G}(\xi_1', \cdots, \eta_1', \cdots)\sum_{j=1}^{n}(\eta_j\xi_j' - \xi_j\eta_j')$$
$$\cdot\exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l x_l + \eta_l p_l)\right]\exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l' x_l + \eta_l' p_l)\right]d\xi_1\cdots d\eta_1\cdots d\xi_1'\cdots d\eta_1'\cdots. \tag{3.7.8}$$

次に座標表示を用いて $(i\hbar)^{-1}[\hat{F}, \hat{G}]\psi$ の計算を実行する．まず(*3.7.7*)によれば

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{F}, \hat{G}]\psi = \int\cdots\int \tilde{F}(\xi_1, \cdots, \eta_1, \cdots)\tilde{G}(\xi_1', \cdots, \eta_1', \cdots)$$
$$\cdot\frac{1}{i\hbar}\left[\exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l x_l + \eta_l\hat{p}_l)\right],\ \exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l' x_l + \eta_l'\hat{p}_l')\right]\right]\psi$$
$$\cdot d\xi_1\cdots d\eta_1\cdots d\xi_1'\cdots d\eta_1'\cdots$$

であるが，

$$X_j = \exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l x_l + \eta_l\hat{p}_l)\right]x_j\exp\left[-i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l x_l + \eta_l\hat{p}_l)\right]$$
$$= x_j + \hbar\eta_j$$
$$\hat{P}_j = \exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l x_l + \eta_l\hat{p}_l)\right]\hat{p}_j\exp\left[-i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l x_l + \eta_l\hat{p}_l)\right]$$
$$= \hat{p}_j - \hbar\xi_j$$

を使えば，積分内の指数関数演算子に関する交換子は

$$\left\{1 - \exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l' x_l + \eta_l'\hat{p}_l)\right]\exp\left[-i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l' X_l + \eta_l'\hat{P}_l)\right]\right\}$$
$$\cdot\exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l x_l + \eta_l\hat{p}_l)\right]\exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l' x_l + \eta_l'\hat{p}_l)\right]$$
$$= \left\{1 - \exp\left[-i\hbar\sum_{l=1}^{n}(\eta_l\xi_l' - \xi_l\eta_l')\right]\right\}$$
$$\cdot\exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l x_l + \eta_l\hat{p}_l)\right]\exp\left[i\sum_{l=1}^{n}(\xi_l' x_l + \eta_l'\hat{p}_l)\right]$$

のように整理することができる．ここまでは何の近似もしていない．次に，‘古典的運動’が実現する場合を想定して $\hbar\to 0$ の極限移行を行う．このとき，

$$\left\{1-\exp\left[-i\hbar\sum_{l=1}^{n}(\eta_l\xi_l'-\xi_l\eta_l')\right]\right\}=i\hbar\sum_{l=1}^{n}(\eta_l\xi_l'-\xi_l\eta_l')+O(\hbar^2)$$

であり，また‘古典的運動’を表す波動関数に対しては指数関数内の演算子 $\hat{p}_l$ が(3.7.5)のように c 数 p_l によっておきかえることができるので，上式の積分はたしかに(3.7.8)に移行する．すなわち，

$$\frac{1}{i\hbar}[\hat{F},\hat{G}]\psi=\{F,G\}\psi+O(\hbar). \qquad (3.7.9)$$

こうして(3.7.1)の成立が証明された．

古典力学への回帰は(3.7.1)の証明で完結したが，量子力学と古典力学の関係をもっと詳細にしらべるため，量子力学の古典的記述を提示しよう．簡単のためハミルトニアンが

$$H=\sum_{j=1}^{n}\frac{1}{2m_j}p_j^2+V(x_1,x_2,\cdots,x_n) \qquad (3.7.10)$$

である場合に話をかぎる．ただし，$m_1=m_2=m_3$，$m_4=m_5=m_6$，$\cdots$，$m_{n-2}=m_{n-1}=m_n$ であり，V は位置座標を通す以外の時間依存性をもたないとする．さて，(3.7.2)のようにおいて，Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left[\sum_{j=1}^{n}\frac{-\hbar^2}{2m_j}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2}+V\right]\psi \qquad (3.7.11)$$

を2個の実関数 $|\psi|$ と W の方程式として書き直したい．簡単な計算により，(3.7.11)は

$$\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t}+\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{1}{m_j}|\psi|^2\frac{\partial W}{\partial x_j}\right)=0 \qquad (3.7.12\,a)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t}+\sum_{j=1}^{n}\frac{1}{2m_j}\left(\frac{\partial W}{\partial x_j}\right)^2+V+\sum_{j=1}^{n}\frac{-\hbar^2}{2m_j}\frac{1}{|\psi|}\frac{\partial^2|\psi|}{\partial x_j}=0 \qquad (3.7.12\,b)$$

のように分解できる．この式の内容を考えよう．$W=(\hbar/2i)\log(\psi/\psi^*)$ から直ちに

$$\frac{1}{m_j}|\psi|^2\frac{\partial W}{\partial x_j}=\frac{\hbar}{2im_j}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x_j}-\frac{\partial\psi^*}{\partial x_j}\psi\right)=J_j$$

が得られるが，J_j は配位空間($x_1,x_2,\cdots,x_n$ のつくる空間)における確率流密度であるから，(3.7.12 a)は確率保存則を与える連続の式に他ならない．一方，(3.7.12 b)は正に古典的な Hamilton-Jacobi の偏微分方程式

$$\frac{\partial W}{\partial t}+H_Q\left(x_1,\cdots,x_n,\frac{\partial W}{\partial x_1},\cdots,\frac{\partial W}{\partial x_n},t\right)=0 \qquad (3.7.13)$$

の形をしている．ただし，この‘ハミルトニアン’H_Qは(3.7.10)のHではなく，それに‘量子力学的ポテンシャル’

$$V_Q=\sum_{j=1}^{n}\frac{-\hbar^2}{2m_j}\frac{1}{|\psi|}\frac{\partial^2|\psi|}{\partial x_j{}^2} \qquad (3.7.14)$$

を加えたものである．(3.7.13)に到って，‘量子力学’はただV_Qのところに存在するだけとなり，ほとんど完全に近い形で古典力学が復活したかのような観を呈する．この意味で，(3.7.12)または(3.7.13)を量子力学の古典的記述とよんでもよいであろう．といっても，量子力学の実質には何の変更も与えない†.

さて，古典的記述をもう少し進めたい．速度を$dx_j/dt=(p_j/m)$と定義すればH_Qの定義から

$$\frac{dx_j}{dt}=\left(\frac{\partial H_Q}{\partial p_j}\right) \qquad (j=1,2,\cdots,n) \qquad (3.7.15\,a)$$

となることは明らかであろう．ただし，右辺の括弧は位置座標，p_j以外の運動量，陽的時間依存性を固定した偏微分である．次に，上記p_jの定義すなわち(3.7.3)と(3.7.13)から

$$\frac{\partial p_j}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{\partial W}{\partial t}=-\frac{\partial H_Q}{\partial x_j}=-\left(\frac{\partial H_Q}{\partial x_j}\right)-\sum_{l=1}^{n}\left(\frac{\partial H_Q}{\partial p_l}\right)\frac{\partial p_l}{\partial x_j}$$
$$=-\left(\frac{\partial H_Q}{\partial x_j}\right)-\sum_{l=1}^{n}\left(\frac{\partial H_Q}{\partial p_l}\right)\frac{\partial p_j}{\partial x_l}$$

を導くことができる(右辺第1項は運動量，x_j以外の位置座標，陽的時間依存性を固定した偏微分)．これと(3.7.15 a)を用いれば

$$\frac{dp_j}{dt}=\frac{\partial p_j}{\partial t}+\sum_{l=1}^{n}\frac{dx_l}{dt}\frac{\partial p_j}{\partial x_l}=-\left(\frac{\partial H_Q}{\partial x_j}\right) \qquad (j=1,2,\cdots,n) \qquad (3.7.15\,b)$$

が得られる．(3.7.15)はH_QをハミルトニアンとするHamiltonの正準方程式に他ならない．なお，(3.7.15)を書き直してNewton型の方程式

$$m_i\frac{d^2\boldsymbol{r}_{(i)}}{dt^2}=-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_{(i)}}(V+V_Q) \qquad (i=1,2,\cdots,N) \qquad (3.7.16)$$

† しかし，D. Bohmはこの記述をもとに正統的なコペンハーゲン解釈に真向から挑戦して，興味ある論争を呼び起こした．残念ながら，ここではその論争にふれている余裕はない．

を出すことはやさしい．

古典的記述における定常状態の役割は面白い．定常状態では $\partial|\psi|/\partial t=0$ であるが，この場合にかぎって‘エネルギー保存則’ H_Q＝一定が成立する．これは§2.3 a)におけるエネルギーと時間の不確定性に関する議論によって理解されるべき内容をもっている．

さて，‘量子力学’が V_Q のところに集中したわけであるが，‘古典的運動’を行う波束に対しては V_Q を無視することができるので，(3.7.13)，(3.7.15)，(3.7.16)はいずれも完全に古典力学に戻る．ここでも古典力学への回帰が確認されたわけである．

古典力学への回帰を基礎にして量子力学の古典近似を展開することができる．すなわち，(3.7.2)の W として古典的 Hamilton-Jacobi の方程式の解をとれば，$W=\sum_{j=1}^{n}\int p_j dx_j-Et$＋定数であるから

$$\psi\propto\exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\sum_{j=1}^{n}\int p_j dx_j-Et\right)\right]$$

と近似してよい．ただし，p_j は Hamilton-Jacobi の方程式の解から(3.7.3)によってつくられる $x_1, x_2, \cdots, x_n$ の関数である．この近似解は§2.2において予想したものであった．古典近似は定常状態に対して詳細に研究されており，WKB 法の名で広く利用されている．ここでは，これ以上古典近似に深入りしている余裕はない．

第4章　量子力学の基礎体系

前章までに構成した量子力学の体系から骨組だけをとりだしてみよう．量子力学の世界には状態にも観測量にも座標表示や運動量表示のあることを見たが，ここでは，いろいろと異なる表示の背後にあって“表示されているもの，そのもの”を問題にするので，話はいきおい抽象的となる．

§4.1　ケットの空間，ブラの空間

その話は，複素数体Ｃ上の線形空間Ｋありき，とするところからはじまる．Ｋの元を $|\varphi\rangle$, $|\psi\rangle$ などと記してケット・ベクトル，あるいは**ケット**という．これらは，だんだんに明らかになるとおり，量子力学的な系の状態を数学の言葉で表すのにもちいられる．

しかし，複素数体Ｃ上の線形空間Ｋとはなんだろう．H. Weyl にしたがっていえば，それは，任意の２元 $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in K$ に対して和とよぶ第３の元 $|\varphi\rangle+|\psi\rangle$ を含み，また任意の複素数 $\alpha \in C$ と任意の $|\varphi\rangle \in K$ に対してｃ数倍とよぶ $\alpha|\varphi\rangle$ を含んで，和とｃ数倍について次の演算規則が成り立っているような集合Ｋのことである．和の存在とこの演算規則が量子力学で重要な重ね合せの原理の言い表しになることはいうまでもない．

和について　$|\varphi\rangle, |\psi\rangle, \cdots \in K$ とするとき

1. $|\varphi\rangle+|\psi\rangle = |\psi\rangle+|\varphi\rangle$　　（交換律）
2. $\{|\varphi\rangle+|\psi\rangle\}+|\chi\rangle = |\varphi\rangle+\{|\psi\rangle+|\chi\rangle\}$　　（結合律）
3. 任意の $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ に対して $|\psi\rangle+|\chi\rangle=|\varphi\rangle$ を満たす元 $|\chi\rangle$ が１つ，そしてただ１つある　　（減法可能）

ｃ数倍について　$\alpha, \beta, \cdots \in C$ として

4. $(\alpha+\beta)|\psi\rangle = \alpha|\psi\rangle+\beta|\psi\rangle$　　（第１分配律）

5. $\alpha\{\beta|\psi\rangle\} = (\alpha\beta)|\psi\rangle$ （結合律）

6. $1|\psi\rangle = |\psi\rangle$

7. $\alpha\{|\varphi\rangle+|\psi\rangle\} = \alpha|\varphi\rangle+\alpha|\psi\rangle$ （第2分配律）

上の規則3から直ちに，任意の $|\psi\rangle$ に対して $|\psi\rangle+\mathbf{0}=|\psi\rangle$ を成り立たせる零元 $\mathbf{0}\in$ K の存在がいえ，C の零元 0 をとって規則 4 で $\beta=0$ とおけば $0|\psi\rangle=\mathbf{0}$ が知れる．このため K の零元と C の零元を同じ文字 0 で表しても混乱を生じない．規則 4 でさらに $\alpha=-\beta=1$ とおけば $|\psi\rangle+(-1)|\psi\rangle=0$．この $(-1)|\psi\rangle$ を $-|\psi\rangle$ と記そう．すると，規則 3 にいう $|\chi\rangle$ は $|\chi\rangle=|\varphi\rangle-|\psi\rangle$ と書けることになる．

この線形空間 K の各元 $|\chi\rangle$ に複素数を対応させる関数 f を考えて，とくに

$$f(\alpha|\chi\rangle+\beta|\chi'\rangle) = \alpha f(|\chi\rangle)+\beta f(|\chi'\rangle)$$

任意の $|\chi\rangle, |\chi'\rangle\in$ K と $\alpha, \beta\in$ C に対し

が成り立つとき，これを K 上の線形汎関数という．

K 上の線形汎関数 f, g と複素数 α に対して，和を

$$\{f+g\}(|\chi\rangle) = f(|\chi\rangle)+g(|\chi\rangle) \tag{4.1.1}$$

によって定義し，c 数倍を

$$\{\alpha f\}(|\chi\rangle) = \alpha\{f(|\chi\rangle)\} \tag{4.1.2}$$

によって定義しよう．これらは，ともに線形汎関数になっており，これで，K 上の線形汎関数の全体がまた上の意味で C 上の線形空間になるのである．検証は読者におまかせしよう．この K 上の線形汎関数の全体なる線形空間を K の共役（キョウヤク）空間とよび K* と記す習慣である．

ここで，Dirac に従って 1 つの仮定をする．

仮定 1　K の元と K* の元との間に 1 対 1 の対応がつき，その対応は $|\psi\rangle$ に f_ψ が，$|\varphi\rangle$ に f_φ が対応するなら $\alpha|\psi\rangle+\beta|\varphi\rangle$ には $\alpha^* f_\psi+\beta^* f_\varphi$ が対応するようなものである．これで K* も C 上の線形空間になるから f_ψ を $|\psi\rangle$ の共役ベクトルという．

この仮定が成り立つか否かは，空間 K が具体的にあたえられれば数学的に決定できるはずのものである．たとえば，K が Hilbert 空間の公理を満たすなら——線形汎関数をある種の連続性をもつものに限った上で——この仮定は成り立つことが証明できる (Riesz の表現定理)．しかし，空間 K を実数軸上で無限回微分可能であり遠方で x のどんな逆ベキよりも速く減少する関数の全体とすると，やは

りある種の連続性を要求したとき K* は超関数の全体となって K よりはるかに多くの元を含むことが知られている．この場合には，だから，上の仮定は成り立たない．

Diracの仮定のもとでは，$|\psi\rangle$ の共役 f_ψ を $\langle\psi|$ と書いて

$$f_\psi(|\chi\rangle) \equiv \langle\psi|\chi\rangle \tag{4.1.3}$$

と書くと便利である．K* の元を $\langle\psi|, \langle\varphi|, \cdots$ などと書くわけで，これらをブラ・ベクトルまたはブラとよぶ．ブラ $\langle\psi|$ とケット $|\chi\rangle$ からきまる c 数 $\langle\psi|\chi\rangle$ が bracket(括弧式)という Diracのシャレだ†．ブラ $\langle\psi|$ は元来が汎関数であるから，K 上のすべての $|\chi\rangle$ に対してそれぞれ値 $\langle\psi|\chi\rangle$ が定まれば，それで一意的に定まる．仮定 1 と (4.1.2) から $f_{\alpha|\psi\rangle}=\alpha^* f_{|\psi\rangle}$ となる(ただし f_ψ をていねいに $f_{|\psi\rangle}$ と書いた)．これはブラ記号では書きにくいが，$\alpha|\psi\rangle$ の共役を仮に $\{\langle\psi|\alpha\}$ と書けば $\{\langle\psi|\alpha\}=\alpha^*\langle\psi|$ となる．そして

$$\{\langle\psi|\alpha+\langle\varphi|\beta\}\,|x\rangle = \alpha^*\langle\psi|x\rangle+\beta^*\langle\varphi|x\rangle \tag{4.1.4}$$

となるが，この事実を“(4.1.3) は $|\psi\rangle$ の関数と見たとき**反線形**である”と言い表す．汎関数 $\langle\psi|$ が $\alpha|\chi\rangle$ でとる値をていねいに $\langle\psi|\,\{\alpha|\chi\rangle\}$ と書けば $\langle\psi|\,\{\alpha|\chi\rangle\}=\{\langle\psi|\alpha^*\}\,|\chi\rangle$ となることに注意しよう．

Diracは，さらに次の仮定をする．

仮定 2　　$\langle\psi|\chi\rangle = \langle\chi|\psi\rangle^*$　　(4.1.5)

仮定 3　　$\langle\psi|\psi\rangle \geqq 0,$　　等号は $|\psi\rangle=0$ の場合　　(4.1.6)

この仮定 2 は仮定 1 と整合的である．実際，仮定 1 によれば $|\eta\rangle=\alpha|\psi\rangle+\beta|\varphi\rangle$ には $\langle\eta|=\alpha^*\langle\psi|+\beta^*\langle\varphi|$ が対応し

$$\langle\eta|\chi\rangle = \alpha^*\langle\psi|\chi\rangle+\beta^*\langle\varphi|\chi\rangle$$

となるが，これは $\langle\chi|\eta\rangle$ の複素共役になっており仮定 2 にあう．仮定 3 が設けられるのは，仮定 2 から $\langle\psi|\psi\rangle$＝実数となるからこそである．$\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}=\|\psi\|$ と書いて $|\psi\rangle$ および $\langle\psi|$ の**ノルム**という．ていねいに $\|\,|\psi\rangle\,\|$ などと書くこともある．$\|\psi\|=1$ のケットまたはブラは**規格化**されているという．

上の仮定から

$$|\langle\psi|\varphi\rangle| \leqq \|\psi\|\cdot\|\varphi\| \qquad \text{(Schwarz の不等式)} \tag{4.1.7}$$

---

† bra を ket に結んでいる c にはロシヤ語で with の意味があることを木庭二郎が指摘した．with に当るラテン語 *cum* の c ともみられよう．$|\psi\rangle, \langle\psi|$ の代りに $\psi\rangle, \langle\psi$ と書くこともある．

が証明される．実際 $|\eta\rangle=\alpha|\psi\rangle+|\varphi\rangle$ に仮定3をもちいて

$$|\alpha|^2\|\psi\|^2+2\,\mathrm{Re}\,\alpha\langle\varphi|\psi\rangle+\|\varphi\|^2\geqq 0$$

とし，$\arg\langle\varphi|\psi\rangle=\gamma$ と実数 ρ をとって $\alpha=\rho e^{-i\gamma}$ とおけば

$$\rho^2\|\psi\|^2+2\rho|\langle\varphi|\psi\rangle|+\|\varphi\|^2\geqq 0.$$

この $-\infty<\rho<\infty$ に対する2次不等式の判別式が(*4.1.7*)である．

とくに，0でない $|\psi\rangle, |\varphi\rangle$ が $\langle\psi|\varphi\rangle=0$ の関係にあるとき，**直交**しているという．ケット $|\chi\rangle$ に対して，規格化された $|\psi\rangle$ による $|\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle$ を，$|\chi\rangle$ の $|\psi\rangle$ 方向への**射影**という．明らかに $|\chi\rangle-|\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle$ は $|\psi\rangle$ に直交する．$\langle\psi|\chi\rangle$ を $|\chi\rangle$ の $|\psi\rangle$ 方向への**成分**という．

§4.2　線形演算子

量子力学において力学変数を数学の言葉で表すのはK上の線形演算子である．

演算子というのは，Kの元にKの元を対応させる関数のことで，演算子 $\hat{A}$ により $|\chi\rangle$ に対応するのは $|\eta\rangle$ であるということを $\hat{A}:|\chi\rangle\mapsto|\eta\rangle$，あるいは $\hat{A}|\chi\rangle=|\eta\rangle$ と書く．2つの演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ がどの $|\chi\rangle\in$ K に対しても同じ $\hat{A}|\chi\rangle=\hat{B}|\chi\rangle$ を対応させるなら $\hat{A}=\hat{B}$ であるという．演算子 $\hat{A}$ が線形であるとは，任意の $|\chi\rangle, |\chi'\rangle\in$ K と任意の $\alpha, \beta\in$ C に対して

$$\hat{A}\{\alpha|\chi\rangle+\beta|\chi'\rangle\}=\alpha\{\hat{A}|\chi\rangle\}+\beta\{\hat{A}|\chi'\rangle\}$$

が成り立つことをいう．

線形演算子の最も簡単な例は，任意の $|\chi\rangle\in$ K にそれ自身を対応させる**恒等演算子**である．これを $\hat{1}$ と書く．$\hat{1}|\chi\rangle=|\chi\rangle$．次に簡単なのは，規格化された固定ケット $|\psi\rangle$ をとって任意の $|\chi\rangle$ に $|\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle$ を対応させる**射影演算子** $\hat{P}_\psi$ であろう．これを $|\psi\rangle\langle\psi|$ と書けば $|\chi\rangle$ にかけて $|\psi\rangle\langle\psi|\chi\rangle$ が自然にできるというぐあいに記号法がスムーズになる．同様の記号法で，$Q_{\varphi\psi}\equiv|\varphi\rangle\langle\psi|$ も線形演算子である．

線形演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対して，複素数 α, β による線形結合を

$$\{\alpha\hat{A}+\beta\hat{B}\}|\chi\rangle=\alpha\{\hat{A}|\chi\rangle\}+\beta\{\hat{B}|\chi\rangle\} \tag{4.2.1}$$

によって定義すれば，これがまた線形演算子になっている．積 $\hat{B}\hat{A}$ を

$$\{\hat{B}\hat{A}\}|\chi\rangle=\hat{B}\{\hat{A}|\chi\rangle\} \tag{4.2.2}$$

により定義すれば，これも線形演算子である．ただし，この積について交換律の成り立つ保証はなく，$\hat{A}$ が逆 $\hat{A}^{-1}$ をもつともかぎらない．今後 $\hat{A}\hat{B}\neq\hat{B}\hat{A}$ がむし

ろ普通であることがわかってくるだろう．射影演算子 $P_\psi=|\psi\rangle\langle\psi|$，$P_\varphi=|\varphi\rangle\langle\varphi|$ に対して，すでに

$$P_\varphi P_\psi=|\varphi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle\langle\psi| \quad と \quad P_\psi P_\varphi=|\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle\langle\varphi|$$

は等しくない．とくに

$$P_\psi{}^2=P_\psi \tag{4.2.3}$$

が成り立つ．$\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$ となる2つの演算子は**可換**であるという．交換するということもある．

$\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\}$——または $\langle\psi|\hat{A}\chi\rangle$——は $|\chi\rangle$ に複素数 $\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\}$ を対応させる線形汎関数とみられるから，Dirac の仮定1により適当な $\langle\varphi|\in\mathsf{K}^*$ をとって

$$\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\}=\langle\varphi|\chi\rangle \tag{4.2.4}$$

と書くことができるはずである．勝手な $|\psi\rangle$ に対して $|\varphi\rangle$ が一意に定まるから，これで演算子が定義できる．これを $\hat{A}$ の**共役演算子**といって，$\hat{A}^\dagger$ と記す．$\hat{A}^\dagger$: $|\psi\rangle\mapsto|\varphi\rangle$．この演算子は線形である．実際，$|\psi\rangle\mapsto|\varphi\rangle$，$|\psi'\rangle\mapsto|\varphi'\rangle$ のときに $\alpha|\psi\rangle+\beta|\psi'\rangle$ に対応するものは

$$\begin{aligned}\{\alpha^*\langle\psi|+\beta^*\langle\psi'|\}\{\hat{A}|\chi\rangle\}&=\alpha^*\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\}+\beta^*\langle\psi'|\{\hat{A}|\chi\rangle\}\\&=\alpha^*\langle\varphi|\chi\rangle+\beta^*\langle\varphi'|\chi\rangle\\&=\{\alpha^*\langle\varphi|+\beta^*\langle\varphi'|\}|\chi\rangle\end{aligned}$$

の計算から $\alpha|\varphi\rangle+\beta|\varphi'\rangle$ と知れる．

たとえば，$Q_{\xi\eta}=|\xi\rangle\langle\eta|$ の共役 $Q_{\xi\eta}{}^\dagger$ は $|\eta\rangle\langle\xi|$ である．実際，(4.2.4)に当る式を書いてみれば

$$\langle\psi|\{|\xi\rangle\langle\eta|\chi\rangle\}=\langle\psi|\xi\rangle\langle\eta|\chi\rangle$$

となり，これで対応 $|\psi\rangle\mapsto\langle\psi|\xi\rangle^*|\eta\rangle$ が定まる．右辺は $|\eta\rangle\langle\xi|\psi\rangle$ に等しいので，この対応 $|\psi\rangle\mapsto|\eta\rangle\langle\xi|\psi\rangle$ は演算子 $|\eta\rangle\langle\xi|$ がひきおこすものにほかならない．とくに，射影演算子 $P_\psi=|\psi\rangle\langle\psi|$ の共役は，それ自身に等しい．

$$P_\psi{}^\dagger=P_\psi \tag{4.2.5}$$

共役が自分自身に等しい線形演算子は**自己共役**，あるいは Hermite 的であるという†．

ケット $\hat{A}^\dagger|\psi\rangle$ に共役なブラを $\{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}$ または $\langle A^\dagger\psi$ と書けば，(4.2.4)は

† これらは厳密にいえば区別しなければならない．本講座第4巻『量子力学II』§16.3 を見よ．

$$\langle\psi|\{\hat{A}|\chi\rangle\} = \{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}|\chi\rangle = (\langle\chi|\{A^\dagger|\psi\rangle\})^* \qquad (4.2.6)$$

と書けることになる．あるいは $\langle\psi|\hat{A}\chi\rangle=\langle\hat{A}^\dagger\psi|\chi\rangle=\langle\chi|A^\dagger\psi\rangle^*$.

さて，線形演算子 $\alpha\hat{A}$ の共役はどうなるか，(4.2.4)に当る式を書いてみると，(4.2.6)の記号法で

$$\begin{aligned}\langle\psi|\{\alpha\hat{A}|\chi\rangle\} &= \alpha\{\langle\psi|\hat{A}^\dagger\}|\chi\rangle \\ &= \{\langle\psi|(\hat{A}^\dagger\alpha^*)\}|\chi\rangle.\end{aligned}$$

後段でブラ $\alpha\langle\psi|$ がケット $\alpha^*|\psi\rangle$ の共役であることを用いた．この結果から

$$(\alpha\hat{A})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger \qquad (4.2.7)$$

が知れる．同様にして

$$(\hat{A}+\hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger+\hat{B}^\dagger \qquad (4.2.8)$$

$$(\hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger. \qquad (4.2.9)$$

このことから $\hat{A}^\dagger A$ の自己共役なことが知れる．また任意の $\psi\in\mathrm{K}$ に対して $\langle\psi|\{\hat{A}^\dagger\hat{A}|\psi\rangle\}=\{\langle\psi|\hat{A}\}\{\hat{A}|\psi\rangle\}=\|\hat{A}|\psi\rangle\|^2\geqq 0$. 一般に，任意の $\psi\in\mathrm{K}$ に対して $\langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle\geqq 0$ が成り立つ演算子 $\hat{B}$ は**正値**であるという．

§4.3　固有値問題

ここでは自己共役な演算子だけを考える．量子力学で力学変数を表すのは自己共役な演算子である†．演算子 $\hat{A}$ が自己共役 $\hat{A}=\hat{A}^\dagger$ ならば，(4.2.6)は簡単に $\langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle$ として誤解を生じない．この $\hat{A}$ はケットに作用すると見てもよいし，ブラに作用すると見てもよいのである．Diracの記号法が力を発揮するのは，こういうときだ．

a)　自己共役演算子の固有値問題

一般に演算子 $\hat{A}$ が与えられたとき，方程式

$$\hat{A}|\chi\rangle = a'|\chi\rangle, \qquad a'\in\mathrm{C}$$

を解くのが固有値問題である．$\hat{A}$ が正方行列で，$|\chi\rangle$ が列ベクトルといった場合は周知であろう．その場合から類推されるとおり，この形の方程式は a' が勝手な複素数では $|\chi\rangle=0$ というトリヴィアルな解しかもたない．トリヴィアルでない解を許す a' の値を $\hat{A}$ の**固有値**という．そのときの解 $|\chi\rangle$ を $\hat{A}$ の固有値 a' に属

† その逆は真でない．後の§4.6に述べる超選択則を参照．

する**固有ベクトル**といい，固有値をラベルにして $|a'\rangle$ のように書くことも多い．固有値問題 $\hat{A}|\chi\rangle=a'|\chi\rangle$ を解くことは，固有値 a' と固有ベクトル $|\chi\rangle$ とを一気に求めることである．固有値，固有ベクトルは1つとは限らない．また，1つの固有値に複数個の1次独立な固有ベクトルが属することもあり，そのような固有値は**縮退している**といわれる．縮退があるときには追加のラベル ν を導入して固有ベクトルを $|a',\nu\rangle$ のように書くとよい:

$$\hat{A}|a',\nu\rangle = a'|a',\nu\rangle. \tag{4.3.1}$$

自己共役演算子の固有値問題には際立った特徴がある．まず，固有値 a' は実数である．なぜなら，(*4.3.1*) より

$$a'\cdot\langle a',\nu|a',\nu\rangle = \langle a',\nu|\hat{A}|a',\nu\rangle$$

となるが，$\hat{A}=\hat{A}^\dagger$ なので (*4.2.6*) から右辺は実数．そして左辺の $\langle a',\nu|a',\nu\rangle$ も実数 $\neq 0$ だから，固有値 a' は実数でなければならない．次に，異なる固有値に属する固有ベクトルがあれば直交する．すなわち，ν と ν' は同じでも異なっても

$$\langle a'',\nu'|a',\nu\rangle = 0, \qquad a'\neq a'' \text{ のとき}. \tag{4.3.2}$$

これは，自己共役な $\hat{A}$ はケット側に作用させてもブラ側に作用させてもよいことから

$$\begin{aligned}\langle a'',\nu'|\hat{A}|a',\nu\rangle &= a'\langle a',\nu'|a'',\nu\rangle \\ &= a''\langle a',\nu'|a'',\nu\rangle\end{aligned}$$

を得て，右辺同士の差をつくれば証明される．

射影演算子 $\hat{P}$ は自己共役であった．(*4.2.3*) によれば，$\hat{P}$ に固有ベクトル $|a',\nu\rangle$ があると $\hat{P}^2|a',\nu\rangle=\hat{P}|a',\nu\rangle$ から $a'^2=a'$．よって，$a'=1$ または 0 でなければならない．実際，勝手なケット $|\psi\rangle$ をとって $\hat{P}|\psi\rangle$, $(1-\hat{P})|\psi\rangle$ をつくると，これらが——$\neq 0$ としてだが——それぞれ固有値 1, 0 に属する固有ベクトルになる．このようにとびとびの固有値は**離散的**であるという．実軸のある区間をベッタリ埋めるような**連続的**な固有値をもつ演算子もある．演算子 $\hat{A}$ の固有値の全体を $\hat{A}$ の**スペクトル**という．

自己共役演算子の固有ベクトルの全体 $\{|a',\nu\rangle\}_{a',\nu}$ は**完全系**をつくる．これは K の任意のケット $|\psi\rangle$ が

$$|\psi\rangle = \int |a',\nu\rangle\alpha(a',\nu)\,da'd\nu \tag{4.3.3}$$

の形に展開できるだけベクトル $|a', \nu\rangle$ が十分に沢山あることを意味している．展開係数を α とした．

いま，簡単のために固有値がすべて離散的で，どれにも縮退がないという演算子の場合をとれば，展開(4.3.3)の具体的な表示ができる．その演算子を $\hat{A}$ として，固有値を $a^{(n)}$，固有ベクトルを $|a^{(n)}\rangle$ $(n=0, 1, 2, \cdots)$ としよう．各 $|a^{(n)}\rangle$ を適当に c 数倍して規格化することにより

$$\langle a^{(n')}|a^{(n)}\rangle = \delta_{n,n'} \tag{4.3.4}$$

にできる．$\delta_{n,n'}$ は Kronecker のデルタである．このような性質をもつベクトルの集合 $\{|a^{(n)}\rangle\}_{n=0,1,2,\dots}$ は正規直交系をなすという．もし完全系でもあれば**完全正規直交系**をなすという．展開(4.3.3)は

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n |a^{(n)}\rangle \tag{4.3.5}$$

の形をとる．このような展開ができるとしたら，両辺に $\langle a^{(m)}|$ をかけて(4.3.4)に注意すればわかるように

$$\alpha_m = \langle a^{(m)}|\psi\rangle \tag{4.3.6}$$

でなければならない．これを(4.3.5)に代入すると

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |a^{(n)}\rangle\langle a^{(n)}|\psi\rangle \tag{4.3.7}$$

となる．これから

$$\sum_{n=0}^{\infty} |a^{(n)}\rangle\langle a^{(n)}| = \hat{1} \tag{4.3.8}$$

の成り立つことが，正規直交系 $\{|a^{(n)}\rangle\}_{n=0,1,2,\dots}$ が完全であるための必要十分条件をなすことがわかる．ついでながら，演算子 $\hat{A}$ は

$$\hat{A} = \sum_{n=0}^{\infty} |a^{(n)}\rangle \alpha_n \langle a^{(n)}| \tag{4.3.9}$$

のように表せる．これを $\hat{A}$ の**スペクトル表示**とよぶ．

固有ベクトルの集合に限らず，(4.3.8)が成り立てば $\{|a^{(n)}\rangle\}_{n=0,1,2,\dots}$ は完全である．もしこれが直交系でなければ**過剰完全系**とよぶ．正規直交系に対しては，(4.3.8)は，任意の $|\psi\rangle \in K$ で

$$\sum_{n=0}^{\infty} |\langle a^{(n)}|\psi\rangle|^2 = \langle\psi|\psi\rangle \qquad \text{(Parseval の等式)}$$

が成り立つことと同値である.

固有値問題には，1個の自己共役演算子に対するものだけでなく，複数個の自己共役演算子 $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \cdots$ の**同時固有ベクトル**を求める問題がある．すなわち

$$\hat{A}_s|a_1', a_2', \cdots, a_h'\rangle = a_s'|a_1', a_2', \cdots, a_h'\rangle \qquad (s=1, 2, \cdots, h) \tag{4.3.10}$$

の固有値 $\{a_s'\}_{s=1,2,\cdots,h}$ と固有ベクトル $|a_1', a_2', \cdots, a_h'\rangle$ を求める．同時固有ベクトルの全体が完全系をなせば，考えている演算子のどの2つも可換なことが容易に示せる:

$$[\hat{A}_r, \hat{A}_s] = 0 \qquad (r, s=1, 2, \cdots, h) \tag{4.3.11}$$

これは同時固有ベクトルの存在の必要条件というわけだが，では，十分条件であろうか？　たしかにそうだということをKが有限次元空間の場合に証明するのは恰好の演習問題である．Kが無限次元空間の場合にも答はある意味で肯定だが，本章で行なっているような形式的な議論では“…ができる”という命題を具体的に“してみせる”以外の仕方で証明する望みはない．正確な答は，だから，本講座第4巻『量子力学II』で数学的な規定を細かくした上で述べることにしよう．

b）測定値の集団平均，確率解釈

以上で，量子力学的な状態と力学変数を言い表す数学的な言葉がそろったことになる．しかし，“言い表す”とはどういうことか？　詳しい説明は観測ということに結びつけて後の§4.6で行う．手短かにいえばこういうことだ：力学変数 $\hat{A}$ ごとに，それを測る観測操作 O_A というものが存在する．定まった状態 $|\psi\rangle$ にある系に対して O_A を行なっても得られる測定値は必らずしも一義的ではないが，同じ状態にある多数の系にそれぞれ O_A を行って得られる測定値の平均値(集団平均)は定まっていて，$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ に一致する．ただし，$|\psi\rangle$ は $\langle\psi|\psi\rangle=1$ に規格化されているものとする．

とくに系が $\hat{A}$ の固有状態の1つ $|a'\rangle$ ($\langle a'|a'\rangle=1$) にあるとき O_A を行えば，確率1で測定値 a' が得られる．それは，測定値の

平均値が $$\langle a'|\hat{A}|a'\rangle = a' \tag{4.3.12}$$

となるのみならず，その平均値のまわりの

ゆらぎが $$\langle a'|(\hat{A}-a')^2|a'\rangle = 0 \tag{4.3.13}$$

となるからである.

一般の状態 $|\psi\rangle$ ($\langle\psi|\psi\rangle=1$) に対しては，$\hat{A}$ の固有関数による展開(*4.3.8*)をもちいて

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |\langle a^{(n)}|\psi\rangle|^2 a^{(n)}. \tag{4.3.14}$$

測定値の集団平均を与えるこの式は，“1つ1つの観測 O_A では測定値として常に $\hat{A}$ の固有値のどれかが得られ，多数の系のうち $a^{(n)}$ を与える系の数の割合が $|\langle a^{(n)}|\psi\rangle|^2$ である”という意味に読むことができる．同一の状態 ψ に同一の観測 O_A をほどこしても得られる測定値が一義的でないことは，まえにも述べたが，$\sum_n|\langle a^{(n)}|\psi\rangle|^2=\langle\psi|\psi\rangle=1$ だから $|\langle a^{(n)}|\psi\rangle|^2$ は状態 ψ において測定値 $a^{(n)}$ が得られる確率を与えている．

測定値の集団平均 $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ も測定値の確率 $|\langle a^{(n)}|\psi\rangle|^2$ も，任意の実数 γ をとって $|\psi\rangle$ を $e^{i\gamma}|\psi\rangle$ でおきかえても変わらない．これは，位相だけちがうケット $|\psi\rangle$，$e^{i\gamma}|\psi\rangle$ は同一の状態を表すことを示している．そのようなケットをすべて同一視して**射線**とよぶ．正確にいえば，だから，物理的な状態を表すのは個々のケットではなくて，射線であるとしなければならない(第8章参照)．

§4.4　正準変数

a)　自由度1の力学系

簡単のために1つの質点が x 軸に沿う1次元の運動をする場合をとれば，この系の力学変数は正準共役な座標 $\hat{x}$ と運動量 $\hat{p}$ からすべて構成される．これらは**正準交換関係**

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar \tag{4.4.1}$$

を満たす自己共役演算子である．ここに $[\hat{A}, \hat{B}]\equiv\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$.

この交換関係から $\hat{p}$ も $\hat{x}$ も実軸全体にわたる連続スペクトルをもつことがいえる．それを示すために，まず

$$[\hat{p}^n, \hat{x}] = \hat{p}^{n-1}[\hat{p}, \hat{x}]+\hat{p}^{n-2}[\hat{p}, \hat{x}]\hat{p}+\cdots+[\hat{p}, \hat{x}]\hat{p}^{n-1}$$

から

$$[\hat{p}^n, \hat{x}] = -ni\hbar\hat{p}^{n-1} \qquad (n=0, 1, 2, \cdots)$$

をだす．任意の実数 a をとって，両辺に $(ia/\hbar)^n/n!$ をかけ $n=0$ から ∞ までの和をとると，演算子の指数関数を

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{i\hat{p}a}{\hbar}\right)^n \equiv e^{i\hat{p}a/\hbar} \tag{4.4.2}$$

と定義して

$$e^{i\hat{p}a/\hbar}\hat{x}-\hat{x}e^{i\hat{p}a/\hbar} = e^{i\hat{p}a/\hbar}a \tag{4.4.3}$$

を得るので

$$e^{i\hat{p}a/\hbar}\hat{x}e^{-i\hat{p}a/\hbar} = \hat{x}+a. \tag{4.4.4}$$

同様にして，任意の実数 k に対し

$$e^{ik\hat{x}}\hat{p}e^{-ik\hat{x}} = \hat{p}-\hbar k. \tag{4.4.5}$$

さて，座標演算子 $\hat{x}$ に 1 つの固有値 x' があったとしよう．

$$\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle.$$

この固有ベクトル $|x'\rangle$ に $e^{-i\hat{p}a/\hbar}$ をかけて得られるベクトル $|x'\rangle_a \equiv e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x'\rangle$ を考えると

$$\hat{x}|x'\rangle_a = \hat{x}e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x'\rangle = e^{-i\hat{p}a/\hbar}(e^{i\hat{p}a/\hbar}\hat{x}e^{-i\hat{p}a/\hbar})|x'\rangle$$

となるが，(4.4.4) により最右辺が簡単になり

$$\begin{aligned}\hat{x}|x'\rangle_a &= e^{-i\hat{p}a/\hbar}(x'+a)|x'\rangle \\ &= (x'+a)|x'\rangle_a.\end{aligned}$$

よって $|x'\rangle_a$ は $\hat{x}$ の固有値 $x'+a$ に属する固有ベクトルである：

$$|x'\rangle_a \equiv e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x'\rangle = |x'+a\rangle \tag{4.4.6}$$

この a は任意の実数であったから，演算子 $\hat{x}$ の固有値は実軸の全体にわたることがわかる†.

上の結論をだすには $|x'+a\rangle$ が 0 ベクトルでないことを確かめておく必要がある．(4.4.2) に (4.2.7〜9) をもちい $U_a \equiv e^{-i\hat{p}a/\hbar}$ の共役演算子は $U_a{}^* = e^{+i\hat{p}a/\hbar}$ と知れ，したがって $|x'+a\rangle = e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x'\rangle$ の共役ブラは $\langle x'+a| = \langle x'|e^{+i\hat{p}a/\hbar}$ となるから

$$\langle x''+a|x'+a\rangle = \langle x''|e^{+i\hat{p}a/\hbar}e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x'\rangle = \langle x''|x'\rangle. \tag{4.4.7}$$

よって $|x'+a\rangle$ は 0 ベクトルではない．ここで，わざわざ x'' と x' をちがえて書いた理由は，間もなく明らかになる．なお，U_a のように共役演算子との積が $U_a{}^*U_a = U_aU_a{}^* = \hat{1}$ となる演算子は**ユニタリー**であるという．

運動量演算子 $\hat{p}$ の固有値が実軸全体にわたることも，上と同様にして (4.4.5)

† a を複素数としてはいけないのか？ 考えよ．

からわかる．実際，1つの固有値 p' があったとして固有ベクトルを $|p'\rangle$ と書けば，(4.4.6)に対応して

$$|p'\rangle_k \equiv e^{ik\hat{x}}|p'\rangle = |p'+\hbar k\rangle. \qquad (4.4.8)$$

(4.4.7)に対応する式は

$$\langle p''+\hbar k|p'+\hbar k\rangle = \langle p''|p'\rangle$$

となる．

これまでは $\hat{x}$ も $\hat{p}$ も固有値に縮退はないとし，固有ベクトルに前節で考えた追加ラベル ν を入れないできた．それでよかっただろうか．

座標演算子 $\hat{x}$ の場合で考えよう．仮に固有値 x' に縮退があったとして，固有ベクトルを $|x',\nu\rangle$ と書くと，(4.4.6)のときと同じ計算から，この縮退はすべての $-\infty<x'<\infty$ に共通なことがいえる．そこで ν の値を互いに入れかえるような関数 $\eta(\nu)$ を考えて，$|x',\nu\rangle$ を $|x',\eta(\nu)\rangle$，$\eta(\nu)\neq\nu$，に変える演算子 $\hat{B}_\eta$ をつくると，これは恒等演算子ではないのに，演算子 $\hat{x}$ とも $\hat{p}$ とも可換である．実際

$$\begin{aligned}\hat{x}\hat{B}_\eta|x',\nu\rangle &= \hat{x}|x',\eta(\nu)\rangle = x'|x',\eta(\nu)\rangle\\ &= \hat{B}_\eta\hat{x}|x',\nu\rangle,\\ e^{-i\hat{p}a/\hbar}\hat{B}_\eta|x',\nu\rangle &= e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x',\eta(\nu)\rangle = |x'+a,\eta(\nu)\rangle\\ &= \hat{B}_\eta e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x',\nu\rangle\end{aligned}$$

が任意の x',ν に対して任意の a で成り立つのである．ところが，いま考えている系の自由度が1であるということは，この系のどんな力学変数も1対の正準変数 $\hat{x},\hat{p}$ の関数として表せることである．そこには $\hat{x}$ とも $\hat{p}$ とも可換でありながら恒等演算子ではないといった演算子が入る余地はない．こうして，ラベル ν はいらないことがわかった．

そうすると $\{|x'\rangle\}_{-\infty<x'<\infty}$ が完全系をなすはずである．すなわち，なんらかの重みの関数 $\rho(x')$ があって

$$\int_{-\infty}^{\infty}|x'\rangle\rho(x')\,dx'\langle x'| = \hat{1} \qquad (4.4.9)$$

となるはず．この式に左から $U_a=e^{-i\hat{p}a/\hbar}$，右から $U_a{}^\dagger$ をかけると

$$\int_{-\infty}^{\infty}|x'+a\rangle\rho(x')\,dx'\langle x'+a| = U_aU_a{}^\dagger = \hat{1}$$

となるが，積分変数を変えて $x'+a$ をあらためて x' と書けば

$$\int_{-\infty}^{\infty}|x'\rangle\rho(x'-a)\langle x'| = \hat{1}$$

これを(4.4.9)に比べて $\rho(x')=\mathrm{const.}\equiv\rho$ が知れ，勝手な $\langle a|$, $|a\rangle$ で挾めば $\rho>0$ がわかる．よって，すべての $|x'\rangle$ を共通に $\sqrt{\rho}$ で割って(これは(4.4.6)を変えない)あらためて $|x'\rangle$ と書けば

$$\int_{-\infty}^{\infty}|x'\rangle dx'\langle x'| = \hat{1}. \tag{4.4.10}$$

これが座標演算子 $\hat{x}$ の固有ベクトルの完全性の関係である．この式に左から $\langle x''|$ をかけると‘正規直交性’

$$\langle x''|x'\rangle = \delta(x''-x') \tag{4.4.11}$$

が知れる．これは連続固有値に属する固有ベクトルの規格化の典型であって，以前の(4.4.7)で何故 x'' と x' とをちがえて書いたかもこれでわかる．(4.4.10), (4.4.11)を離散固有値の場合の(4.3.8), (4.3.4)に比較せよ．

運動量演算子 $\hat{p}$ の固有ベクトルに対しても，完全性

$$\int_{-\infty}^{\infty}|p'\rangle dp'\langle p'| = \hat{1} \tag{4.4.12}$$

と，正規直交性

$$\langle p''|p'\rangle = \delta(p''-p') \tag{4.4.13}$$

が成り立つ．

では，$\hat{x}$ の固有ベクトルと $\hat{p}$ の固有ベクトルの関係はどうか．(4.4.6)に $\langle p'|$ をかけると，$\langle p'|\hat{p}=\langle p'|p'$ だから

$$e^{-ip'a/\hbar}\langle p'|x'\rangle = \langle p'|x'+a\rangle.$$

ここで

$$\langle p'|x'\rangle \equiv c(x';p')e^{-ip'x'/\hbar} \tag{4.4.14}$$

とおけば，c は p' だけの関数であることがわかる:

$$c(x';p') = c(x'+a;p') \equiv c(p'). \tag{4.4.15}$$

次に，(4.4.8)に $\langle x'|$ をかけて得る式

$$e^{ikx'}\langle x'|p'\rangle = \langle x'|p'+\hbar k\rangle$$

に(4.4.14)を代入すると，(4.4.16)を考慮して

$$c(p')^* = c(p'+\hbar k)^*.$$

つまり c は p' にもよらない定数である．ゆえに

$$\langle p'|x'\rangle = ce^{-ip'x'/\hbar}.$$

定数 c は規格化条件(4.4.11)から定められる．(4.4.12)により

$$\langle x''|x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x''|p'\rangle dp'\langle p'|x'\rangle$$

$$= |c|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{ip'(x''-x')/\hbar}dp' = |c|^2\cdot 2\pi\hbar\delta(x''-x')$$

したがって，$c=1/\sqrt{2\pi\hbar}$. これに定数位相をつけて複素数にしてもよいが，煩雑なだけで益がない．よって

$$\langle p'|x'\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}e^{-ip'x'/\hbar}. \qquad (4.4.16)$$

この結果が，いまの計算で顧慮しなかった条件(4.4.10)，(4.4.13)にも適っていることは容易に確かめられる．

運動量演算子の固有関数の全体 $\{|p'\rangle\}_{-\infty<p'<\infty}$ は，いま問題にしている力学系の状態空間 K で完全正規直交系をなしているので，K の**基底ベクトル**として使うことができる．上の $\langle p'|x'\rangle$ は，この基底に関するベクトル $|x'\rangle$ の成分である．この基底を運動量を対角化する基底という．他方，$\{|x'\rangle\}_{-\infty<x'<\infty}$ は座標を対角化する基底である．2 つの基底は，(4.4.12)によれば

$$|x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}|p'\rangle dp'\langle p'|x'\rangle \qquad (4.4.17)$$

のように結ばれるので $\langle p'|x'\rangle$ を基底の変換関数ともいう．

状態空間 K の任意のベクトル $|\psi\rangle$ は，たとえば基底 $\{|x'\rangle\}_{-\infty<x'<\infty}$ に関する成分 $\{\langle x'|\psi\rangle\}_{-\infty<x'<\infty}$ を与えることで完全に決定される．このような表し方をベクトルの**座標表示**という．同様にして**運動量表示**も定義される．すぐ後に説明するとおり $|\psi\rangle$ の座標表示 $\langle x'|\psi\rangle$ が前章までに波動関数 $\psi(x')$ と言ってきたものにほかならない．

演算子 $\hat{A}$ も，基底に関する行列要素 $\{\langle x''|\hat{A}|x'\rangle\}_{-\infty<x',x''<\infty}$ で座標表示される．これによって，実際，$\hat{A}|\psi\rangle$ の座標表示が

$$\langle x''|\hat{A}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x''|\hat{A}|x'\rangle dx'\langle x'|\psi\rangle \qquad (4.4.18)$$

のように決定できるからである．(4.4.10)をもちいると，演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ の積の座標表示が，それぞれの座標表示から

$$\langle x''|\hat{A}\hat{B}|x'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x''|\hat{A}|x'''\rangle\langle x'''|\hat{B}|x'\rangle dx'''$$

のように'行列の掛算の規則'によって得られることに注意しよう．すべて**運動量表示**についても同様である．

表示を変えると，$\langle x'|\psi\rangle$ は

$$\langle p'|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle p'|x'\rangle dx'\langle x'|\psi\rangle \tag{4.4.19}$$

のように変換する．それに対して，$\langle x''|\hat{A}|x'\rangle$ の変換は

$$\langle p''|\hat{A}|p'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle p''|x''\rangle dx''\langle x''|\hat{A}|x'\rangle dx'\langle x'|p'\rangle. \tag{4.4.20}$$

このように，$\langle p'|x'\rangle$ は表示の**変換関数**でもある．(4.4.19) を変換行列 $\langle p'|x'\rangle$ によるベクトル成分の変換とみれば，(4.4.20) は2階のテンソルの変換といえる．

演算子 $\hat{x}, \hat{p}$ の座標表示を決定しよう．$\hat{x}$ のほうは

$$\langle x''|\hat{x}|x'\rangle = x'\langle x''|x'\rangle = x''\delta(x''-x'). \tag{4.4.21}$$

$\hat{p}$ については，(4.4.6) に $\langle x''|$ をかけた式を a で微分し，$a=0$ とおくことにより

$$\langle x''|\hat{p}|x'\rangle = \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial a}\langle x''|x'+a\rangle\right]_{a=0} = i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x''-x')$$

あるいは

$$\langle x''|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x'). \tag{4.4.22}$$

これらを $\psi(x')=\langle x'|\psi\rangle$ にかけてみよう．(4.4.18) により

$$\langle x''|\hat{x}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}x''\delta(x''-x')dx'\langle x'|\psi\rangle = x''\langle x''|\psi\rangle \tag{4.4.23}$$

座標演算子 $\hat{x}$ は，$|\psi\rangle$ の座標表示 $\langle x''|\psi\rangle$ に対する作用でみれば，たしかに第3章までに使ってきたとおりの掛算演算子になっている．また，

$$\langle x''|\hat{p}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x')dx'\langle x'|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\langle x''|\psi\rangle \tag{4.4.24}$$

から，運動量演算子 $\hat{p}$ も座標表示では以前に使ってきたとおりの微分演算子を再現している．そして，いずれも，$\langle x''|\psi\rangle$ が波動関数の役をしている．以前には，

波動関数に作用して $\langle x''|\psi\rangle \mapsto \langle x''|\hat{x}|\psi\rangle$ とする演算子を $\hat{x}$ と記すなどしたのだった．$\hat{x}, \hat{p}$ の運動量表示については，もはや計算を示す必要はあるまい．

(4.4.22) から $\hat{p}^2$ の表示を計算してみよう．

$$\begin{aligned}\langle x'''|\hat{p}^2|x'\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\langle x'''|\hat{p}|x''\rangle dx''\langle x''|\hat{p}|x'\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'''}\delta(x'''-x'')\right]dx''\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x')\right]\end{aligned} \tag{4.4.25}$$

すなわち

$$\langle x''|\hat{p}^2|x'\rangle = \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\right)^2\delta(x''-x').$$

これをくりかえして $\hat{p}$ の代数式の座標表示が構成される．$\hat{p}$ の任意関数 $F(\hat{p})$ も，代数式で近似して考えれば

$$\langle x''|F(\hat{p})|x'\rangle = F\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\right)\delta(x''-x'). \tag{4.4.26}$$

同様に，$\hat{x}$ の任意関数 $G(\hat{x})$ に対して

$$\langle x''|G(\hat{x})|x'\rangle = G(x'')\delta(x''-x'). \tag{4.4.27}$$

したがって，たとえばハミルトニアン演算子 $\hat{H}=(2\mu)^{-1}\hat{p}^2+V(\hat{x})$ の座標表示は

$$\langle x''|\hat{H}|x'\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x''^2}+V(x'')\right]\delta(x''-x') \tag{4.4.28}$$

となり，固有値問題 $\hat{H}|E'\rangle = E'|E'\rangle$ は Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x'^2}+V(x')-E'\right]\langle x'|E'\rangle = 0 \tag{4.4.29}$$

をあたえる．エネルギーの固有関数 $u_{E'}(x') \equiv \langle x'|E'\rangle$ は $|E'\rangle$ の座標表示であると同時に，座標表示をエネルギー表示に変える変換関数でもある．

(4.4.25) と同様の計算で (4.4.21), (4.4.22) が正準交換関係 (4.4.1) を満たすことも検証される．読者，試みよ．

しかし，正準交換関係 (4.4.1) を満たすだけなら，運動量演算子は (4.4.22) のようでなくてもよかったのである．このことは以前に 138 頁の脚注で注意した．この節の計算で (4.4.22) が必然的にでてきたように見えるのはなぜだろう？

その理由は(*4. 4. 6*)の位相の任意性にある. $e^{-i\hat{p}a/\hbar}|x'\rangle$ は任意の実関数 $\sigma(x':a)$ をとって $e^{i\sigma(x':a)}|x'+a\rangle$ に等しいとおいてもよかったのである(ただし $\sigma(x':0)=0$. そうしていたら, (*4. 4. 22*)は

$$\langle x''|\hat{p}|x'\rangle = \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial a}e^{i\sigma(x':a)}\langle x''|x'+a\rangle\right]_{a=0}$$

のように計算することになり

$$\langle x''|\hat{p}|x'\rangle = \left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}-\hbar\gamma(x'')\right]\delta(x''-x')$$

となる. ここに $\gamma(x'')\equiv\partial\sigma(x'':0)/\partial a$.

b) 多自由度の系

3次元空間を運動する1つの質点という力学系に対しては, 直交座標系で座標と運動量の演算子 $\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_f, \hat{p}_1, \cdots, \hat{p}_f$ のそれぞれ $f=3$ 個が必要である. 質点が N 個あれば $f=3N$. 一般に自由度 f の力学系では, 正準交換関係は, $r, s=1, 2, \cdots, f$ として

$$\left.\begin{array}{c}[\hat{p}_r, \hat{x}_s] = -i\hbar\delta_{r,s} \\ [\hat{p}_r, \hat{p}_s] = 0, \qquad [\hat{x}_r, \hat{x}_s] = 0\end{array}\right\} \qquad (4.4.30)$$

この場合に前項の議論を拡張することは容易であって, たとえば運動量表示から座標表示への変換関数は

$$\langle p_1', p_2', \cdots, p_f'|x_1', x_2', \cdots, x_f'\rangle = \prod_{s=1}^{f}(2\pi\hbar)^{-1/2}e^{-ip_s'x_s'/\hbar} \qquad (4.4.31)$$

座標演算子の座標表示は

$$\langle x_1'', x_2'', \cdots, x_f''|\hat{x}_s|x_1', x_2', \cdots, x_f'\rangle = x_s''\prod_{r=1}^{f}\delta(x_r''-x_r'). \qquad (4.4.32)$$

運動量演算子のほうは

$$\langle x_1'', x_2'', \cdots, x_f''|\hat{p}_s|x_1', x_2', \cdots, x_f'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_s''}\prod_{r=1}^{f}\delta(x_r''-x_r') \qquad (4.4.33)$$

となる.

もし, 考える粒子がスピンなどの内部自由度をもっているなら, 前項で触れた追加のラベル ν が必要になる. そのとき, 変換関数の議論では前項の(*4. 4. 14*)に相当する式の c には ν がはいる. 内部自由度に関わる表示も同時に変えるなら,

c は定数でなく変換関数は(4. 4. 31)と内部自由度に関する変換関数の積になる.

一般に，たがいに交換する観測量の組 $\{\hat{A}_s\}_{s=1,\dots,h}$ があって，それらの固有値の任意の1組 $\{\lambda_s\}_{s=1,\dots,h}$ に応ずる同時固有ベクトルが1つにかぎるとき，この演算子の組は**完全**であるという．詳しくは，交換する観測量の完全な組といい，**極大観測量**ともいう.

極大観測量の同時固有ベクトルの全体は状態空間の基底に使うことができ，これによって表示が決まる.

c)　Dirac 空間

§4.1でケットの空間に対してブラの空間を導入したときには，ブラをケットの空間Kの上の線形汎関数としたのである．これは，ブラ $\langle\psi|$ が任意のケット $|\chi\rangle$ に複素数を対応させることを意味していた．その複素数を $\langle\psi|\chi\rangle$ と書いたのだった.

しかし，(4. 4. 11)の $\langle x''|x'\rangle$ は複素数だろうか？　(4. 4. 13)の $\langle p''|p'\rangle$ は？さらに(4. 4. 22)などは？

理論を発展させてきたら破綻が生じた．$\langle x''|x'\rangle$ として立ち現れた $\delta(x''-x')$ は普通の関数ではないから，x'' を固定しても x' に対して数値が決まることはない．しかし，だからといって，これまでに行ってきたような形式的な運算に支障がおこるわけではない．このことは $\langle x''|x'\rangle=\delta(x''-x')$ などの可能性を心に留めながら本章の議論を読み返してみれば納得されよう．数学的な規定は難かしいが，これまでに姿を現してきたブラとケットの空間をひとまず認めて，Dirac 空間とよんでおくことにしよう.

もちろん§4.1に述べたDiracの仮定の当否は，ケットやブラの定義を正確に与えて数学的に吟味すべきことで，ここには今日でも十分な解決のない残された問題がある．こういう問題には本講座第4巻『量子力学II』で触れることにしたい.

§4.5　運動方程式

a)　Heisenberg 描像

前節に説明した力学変数の構成は正準交換関係(4. 4. 1), (4. 4. 30)にもとづいていた．その正準交換関係は，(3. 1. 21), (3. 3. 3)のところで説明したように古

典力学における Poisson 括弧 { , } を演算子の関係 $(i\hbar)^{-1}[\ ,\ ]$ に転釈したものと見ることができる．古典力学における運動方程式も Poisson 括弧で書き表せるから，同じ転釈のルールで量子力学に移される．その結果が Heisenberg の運動方程式(3.3.8)であった：

$$\frac{d}{dt}\hat{F}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}(t), \hat{H}]. \tag{4.5.1}$$

ただし，ここでは $\hat{F}$ にあらわな時間依存性はないとした．という意味は，$\hat{F}$ が正準変数 $\{\hat{x}_s(t), \hat{p}_s(t)\}_{s=1,\cdots,f}$ の関数

$$\hat{F} = \hat{F}(\hat{x}_1(t), \cdots, \hat{x}_f(t), \hat{p}_1(t), \cdots, \hat{p}_f(t)) \tag{4.5.2}$$

であって，その時間依存性は正準変数の時間変化だけからくるということ．そのほかに $\hat{F}(\hat{x}_1(t), \cdots, \hat{p}_f(t)\ ;t)$ のような形で時間変数が生で——あらわに——入っていることはない $(\partial\hat{F}/\partial t=0)$ ということである．(4.5.1)の $\hat{F}(t)$ は(4.5.2)の略記とみてほしい．

いま，ハミルトニアン演算子を

$$\hat{H} = \sum_{s=1}^{f}\frac{1}{2\mu_s}\hat{p}_s{}^2 + V(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_f) \tag{4.5.3}$$

として，Heisenberg の運動方程式(4.5.1)を正準変数に対して書き下してみよう．それには多少の準備がいる．

まず，(4.5.1)が

$$\hat{F}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{F}(0)e^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{4.5.4}$$

の形に解けてしまうことに注意しよう．この意味でハミルトニアンを**時間推進の生成演算子**という．とくに $\hat{F}(0)=\hat{H}$ にとると

$$\hat{H}(t) = \hat{H}. \tag{4.5.5}$$

すなわちハミルトニアン演算子は時間がたっても変わらない(**時間推進不変**)ことがわかる．このため，時刻0で $\hat{H}$ の固有ベクトルであった $|E'\rangle$ は，勝手な時刻 t に $\hat{H}(t)$ の同じ固有値の固有ベクトルということになるから，(4.5.5)は**エネルギー保存則**の言い表しとみてよい．

また，たとえば $\hat{p}_r(0)=\hat{p}_r$ などとして

$$\begin{aligned} e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{p}_r\hat{x}_s e^{-i\hat{H}t/\hbar} &= e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{p}_r e^{-i\hat{H}t/\hbar}\cdot e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{x}_s e^{-i\hat{H}t/\hbar} \\ &= \hat{p}_r(t)\,\hat{x}_s(t) \end{aligned}$$

のような計算から，正準交換関係(4.4.30)も時間推進不変なことが知れる：

$$\left.\begin{aligned}[\hat{p}_r(t),\hat{x}_s(t)]&=-i\hbar\delta_{r,s}\\ [\hat{p}_r(t),\hat{p}_s(t)]=0,\qquad[\hat{x}_r(t),\hat{x}_s(t)]&=0\end{aligned}\right\}\tag{4.5.6}$$

交換子をとる演算子の対の時刻が等しいことを**同時刻の交換関係**という表現で強調することがある．同時刻の正準交換関係は時刻0での正準交換関係に等しい，というように．もっとも，このことは使わないでもすむ．

さて，(4.5.5)によれば(4.5.1)は

$$\frac{d}{dt}\hat{F}(t)=\frac{1}{i\hbar}e^{i\hat{H}t/\hbar}[\hat{F},\hat{H}]e^{-i\hat{H}t/\hbar}\tag{4.5.7}$$

のように計算してもよい．ただし，$\hat{F}(0)\equiv\hat{F}$. このことは，今後ことわらない．(4.5.3)から容易に

$$\frac{d}{dt}\hat{x}_s(t)=\frac{1}{i\hbar}e^{i\hat{H}t/\hbar}[\hat{x}_s,\hat{H}]e^{-i\hat{H}t/\hbar}=e^{i\hat{H}t/\hbar}\frac{\hat{p}_s}{\mu}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

すなわち

$$\frac{d}{dt}\hat{x}_s(t)=\frac{1}{\mu}\hat{p}_s(t)\qquad(s=1,\cdots,f).\tag{4.5.8}$$

次に $d\hat{p}_s(t)/dt$ を求めるには，$[\hat{p}_s,\ V(\hat{x}_1,\cdots,\hat{x}_f)]$ を計算しなければならない．この計算は V が $\hat{x}_1,\cdots,\hat{x}_f$ の多項式なら容易である．そうでないときには，座標表示をとって次のように計算するとよい：

$$\begin{aligned}&\langle x_1''',\cdots,x_f'''|\hat{p}_sV(\hat{x}_1,\cdots,\hat{x}_f)|x_1',\cdots,x_f'\rangle\\ &=\int\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_s'''}\prod_r\delta(x_r'''-x_r'')\right]dx_1''\cdots dx_f''\left[V(x_1'',\cdots,x_f'')\prod_u\delta(x_u''-x_u')\right]\\ &=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_s'''}\left[V(x_1''',\cdots,x_f''')\prod_u\delta(x_u'''-x_u')\right].\end{aligned}$$

$V\hat{p}_s$ についても同様に計算して，引き算をすれば

$$\langle x_1''',\cdots,x_f'''|[\hat{p}_s,\ V]|x_1',\cdots,x_f'\rangle=-i\hbar\frac{\partial V}{\partial x_s'''}\cdot\prod_{u=1}^{f}\delta(x_u'''-x_1').$$

これは

$$[\hat{p}_s,\ V(\hat{x}_1,\cdots,\hat{x}_f)]=-i\hbar\frac{\partial V(\hat{x}_1,\cdots,\hat{x}_f)}{\partial\hat{x}_s}\tag{4.5.9}$$

を意味している．右辺では，Vの変数が演算子であるのをc数であるかのように

みて微分をするのだ．こうして

$$\frac{d}{dt}\hat{p}_s(t) = -\frac{\partial V(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_f)}{\partial \hat{x}_s}\bigg|_{\hat{x}_1=\hat{x}_1(t), \cdots, \hat{x}_f=\hat{x}_f(t)} \qquad (s=1, \cdots, f). \tag{4.5.10}$$

(4.5.8) と (4.5.9) が量子力学における**正準運動方程式**である．形の上では古典力学におけるものと異ならない．

この運動方程式の解は，(3.4.19) に調和振動子の場合について例示されている．

b) 保存則，ビリアル定理，総和則

(4.5.5) でハミルトニアンが保存量であることを注意したが，一般に，時間にあらわによらない観測量はハミルトニアンと交換するなら保存される．実際に，$\partial\hat{B}/\partial t$ で $[\hat{B}, H]=0$ なら $\hat{B}(t)=\hat{B}=$一定．そのような量が $\hat{B}, \hat{C}, \cdots$ のように複数個あれば，それらの交換子 $[\hat{B}, \hat{C}], \cdots$ も保存量である．実際，交換子に対して一般に Jacobi の恒等式

$$[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}]+[[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B}]+[[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A}] = 0 \tag{4.5.11}$$

が成り立つので，いまの場合 $\hat{A}=\hat{H}$ とおいてみると

$$[[\hat{B}, \hat{C}], \hat{H}] = 0 \tag{4.5.12}$$

が知れる．

時間にあらわに依存する観測量 $\hat{G}(\hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_f, \hat{p}_1, \cdots, \hat{p}_f; t)$ が保存されることもある．これを $\hat{G}(\cdot\,; t)$ と略記すれば運動方程式は

$$\frac{d}{dt}\hat{G}(\cdot\,; t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{G}(\cdot\,; t), H]+\frac{\partial \hat{G}(\cdot\,; t)}{\partial t}. \tag{4.5.13}$$

例として，ハミルトニアンが

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\hat{p}^2+\mu g\hat{x} \tag{4.5.14}$$

の場合を考えると，

$$G_1 = \hat{p}(t)-\mu gt, \qquad G_2 = \hat{x}(t)-\frac{t}{\mu}\hat{p}(t)-\frac{1}{2}gt^2$$

が $dG_j/dt=0$, $j=1, 2$ を満たし保存量になる．読者は，これらの量の物理的意味がいえるか？

保存量というのではないが，ハミルトニアンとの交換関係から得られる重要な結論を述べておく．それは，(4.5.3) のハミルトニアンの場合

$$\frac{d}{dt}\sum_s \hat{p}_s\hat{x}_s = \frac{1}{i\hbar}\left[\sum_s \hat{p}_s\hat{x}_s, \hat{H}\right] = 2\sum_s \frac{1}{2\mu_s}\hat{p}_s{}^2 - \sum_s \hat{x}_s\frac{\partial V}{\partial \hat{x}_s}$$

を $\hat{H}$ の固有ベクトル $|E', \nu\rangle$ で挾み，$\langle E', \nu|[\cdot, \hat{H}]|E', \nu\rangle = 0$ に注意すれば得られる：

$$2\left\langle E', \nu\left|\sum_s \frac{1}{2\mu_s}\hat{p}_s{}^2\right|E', \nu\right\rangle = \left\langle E', \nu\left|\sum_s \hat{x}_s\frac{\partial V}{\partial \hat{x}_s}\right|E', \nu\right\rangle. \quad (4.5.15)$$

これを**ビリアル定理**という†．もっとも，$|E', \nu\rangle$ での期待値が無限大になる場合(たとえば散乱状態)には無意味である．読者は V が $\hat{x}_s$ の同次式である場合に(4.5.15)を具体化してみよ．調和振動子のポテンシャルや Coulomb ポテンシャルは，この場合に属する．

エネルギー固有状態とは限らない一般の状態 $|\psi\rangle$ による期待値については，もし $\left\langle \psi\left|\sum_s \hat{p}_s(t)\,\hat{x}_s(t)\right|\psi\right\rangle$ が t につき一様に有界なら，長時間平均を

$$\langle A\rangle \equiv \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_0^T dt\langle\psi|\hat{A}(t)|\psi\rangle \quad (4.5.16)$$

で定義するとき

$$\left\langle\frac{d}{dt}\sum_s \hat{p}_s(t)\,\hat{x}_s(t)\right\rangle = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\left\langle\psi\left|\sum_s\{\hat{p}_s(T)\,\hat{x}_s(T) - \hat{p}_s(0)\,\hat{x}_s(0)\}\right|\psi\right\rangle = 0$$

が成り立ち

$$2\left\langle\sum_s \frac{1}{2\mu_s}\hat{p}_s{}^2\right\rangle = \left\langle\sum_s \hat{x}_s\frac{\partial V}{\partial \hat{x}_s}\right\rangle \quad (4.5.17)$$

がいえる．これもビリアル定理とよばれる．

また，ハミルトニアン(4.5.3)に対して

$$\hat{x}_r\hat{H}\hat{x}_r - \frac{1}{2}\{\hat{x}_r{}^2\hat{H} + \hat{H}\hat{x}_r{}^2\} = \frac{1}{2}[[\hat{x}_r, \hat{H}], \hat{x}_r] = \frac{\hbar^2}{2\mu_r}$$

という計算ができるので，規格化された $|E', \nu'\rangle$ で挾むと

$$\sum_{E'', \nu''}(E'' - E')|\langle E', \nu'|\hat{x}_r|E'', \nu''\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu_r} \qquad (r = 1, \cdots, f) \quad (4.5.18)$$

ただし，E'', ν'' が連続な範囲については $\sum$ を積分と了解する．これを **Thomas-Reiche-Kuhn の総和則**とよぶ．

† ビリアル定理の virial は，ラテン語で力とか強さを表す vires からきている．たしかに(4.5.15)の右辺は(力)×(距離)のようなものである．

c) Schrödinger 描像

状態 $|\psi\rangle$ にある力学系について観測量 $\hat{F}$ を時刻 t に観測して得る値は，一義的には予言できないが，期待値は §4.3 b) に述べたとおり $\langle\psi|\hat{F}(t)|\psi\rangle$ と知れている．このことは (*3.2.25*) でも説明した．ただし，$|\psi\rangle$ は規格化されているものとする．

$\hat{F}(t)$ が t をあらわに含まないなら (*4.5.4*) が成り立つので，期待値は

$$\langle\psi|\hat{F}(t)|\psi\rangle = \langle\psi(t)|\hat{F}|\psi(t)\rangle \tag{4.5.19}$$

とも書ける．ただし

$$|\psi(t)\rangle \equiv e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle \tag{4.5.20}$$

を定義した．(*4.5.19*) は力学系の時間発展の記述が状態ベクトルの側でも等価に行えることを示す．この記述を **Schrödinger 描像**とよぶ．以前のような観測量の時間発展による記述を **Heisenberg 描像**とよぶ．

Schrödinger 描像において，$e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ は §4.4 a) でもちいた $e^{-i\hat{p}a/\hbar}$ と同じくユニタリー演算子だから

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi|\psi\rangle \tag{4.5.21}$$

が成り立つ．(*4.5.20*) から

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle. \tag{4.5.22}$$

この式の座標表示をとれば，ハミルトニアンが (*4.5.3*) のとき，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x_1', \cdots, x_f'|\psi(t)\rangle = \left[-\sum_{s=1}^{f}\frac{\hbar^2}{2\mu_s}\frac{\partial^2}{\partial x_s'^2}+V(x_1', \cdots, x_f')\right]\langle x_1', \cdots, x_f'|\psi(t)\rangle. \tag{4.5.23}$$

これは Schrödinger の波動方程式である．$|\psi(t)\rangle$ の座標表示 $\langle x_1, \cdots, x_f|\psi(t)\rangle$ がいわゆる波動関数 $\psi(x_1, \cdots, x_f; t)$ になっている．

方程式 (*4.5.22*) あるいは (*4.5.23*) は，$t=0$ における初期値 $|\psi(0)\rangle$ あるいは $\langle x_1', \cdots, x_f'|\psi(0)\rangle$ $(-\infty < x_1', \cdots, x_f' < \infty)$ を与えられて解くのである．一般に，それは容易な仕事ではないが，もしハミルトニアンの固有関数の完全正規直交系 $\{|E_k, \nu_n\rangle\}_{k,n=0,1,\ldots}$ があらかじめ知れていれば，直ちに

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{k,n} e^{-iE_kt/\hbar}|E_k, \nu_n\rangle\langle E_k, \nu_n|\psi(0)\rangle. \tag{4.5.24}$$

この式は固有値 E_k と付加的なラベル ν_n を仮に離散的として書いたが，連続的な

値をとる区間があれば，その区間では和を積分でおきかえる．(*4.5.24*)を座標表示すれば波動関数の式になる．

d）相互作用描像

これはHeisenberg描像とSchrödinger描像の中間に位置するもので，ハミルトニアンを適当な仕方で

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

のように分けて，力学変数の時間変化をH_0で定め，残る時間変化を状態ベクトルに負わせる．とくに$H'=0$のときには状態ベクトルは変化しない．無限に離れていた2つの系が互いに近寄って，ある時間だけ相互作用をし，また無限の遠方に別れてゆくといった場合，H'をこの相互作用にとれば，過去と未来の状態ベクトルを比べることで相互作用の効果がとりだせるので都合がよい．この描像は，朝永が場の量子論を相対論的に共変な形に定式化するために利用したので，**朝永描像**ともいう．

この描像では，力学変数の時間変化を，(*4.5.4*)にならって

$$\hat{F}_{\mathrm{I}}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{F}e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \tag{4.5.25}$$

ときめるので，状態ベクトル$\psi_{\mathrm{I}}(t)$の時間変化は，期待値がHeisenbergやSchrödingerの表式(*4.5.19*)に等しくなるという条件から

$$|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle \tag{4.5.26}$$

となる．時間で微分すると

$$\frac{d}{dt}e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \frac{i}{\hbar}e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}(\hat{H}_0-\hat{H})e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

だから

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle = \hat{H}'(t)|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle \tag{4.5.27}$$

が相互作用描像における状態ベクトルの運動方程式になる．ここに

$$\hat{H}'(t) \equiv e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{H}'e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \tag{4.5.28}$$

(*4.5.27*)の解は，異なるtの$\hat{H}'(t)$が一般に可換でないため

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \hat{H}'(s)\,ds\right]|\psi\rangle$$

とするわけにいかない．しいて書けば，

$$|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi\rangle \tag{4.5.29}$$

として

$$\hat{U}(t) = 1+\frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}'(t_a)\,dt_a+\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2\int_0^t dt_b\int_0^{t_b} dt_a\hat{H}'(t_b)\,\hat{H}'(t_a)+\cdots \tag{4.5.30}$$

となる．いま，与えられた $t_1, t_2, \cdots, t_n$ を時刻の前後にしたがって並べかえたら $t_l \geqq \cdots \geqq t_b \geqq t_a$ になるとき P 記号を

$$P[\hat{H}'(t_1), \hat{H}'(t_2), \cdots, \hat{H}'(t_n)] = \hat{H}'(t_l)\cdots\hat{H}'(t_b)\,\hat{H}'(t_a) \tag{4.5.31}$$

によって定義すれば，上の $\hat{U}(t)$ は指数関数の展開式に似せた形に書くことができる：

$$\hat{U}(t) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n\int_0^t dt_n\cdots\int_0^{t_2} dt_1 P[\hat{H}'(t_n), \cdots, \hat{H}'(t_1)].$$

これを**順序つき指数関数**とよんで

$$\hat{U}(t) = P\exp\left[\frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}'(s)\,ds\right] \tag{4.5.32}$$

と書くことも多い．本来は(4.5.26)に見るとおり $U(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ だから，これはユニタリーである：

$$\hat{U}(t)^*\hat{U}(t) = \hat{U}(t)\,\hat{U}(t)^* = \hat{1}. \tag{4.5.33}$$

読者は，この式が成り立つことを(4.5.30)をもちいて示せ．

§4.6 物理的解釈

前節までの数学形式に物理的解釈を与えるのが観測の公理である．それは次のことを主張する：

どんな観測量 $\hat{A}$ にも，対応する物理的観測手段 O_A が存在して，その観測をすると，観測値として得られるのは必ず $\hat{A}$ の固有値 $a', a'', \cdots$ のどれかであり，それがたとえば a' であったとすれば，観測の直後に再び同じ観測量 $\hat{A}$ の観測を行えば，こんどは必らず同じ観測値 a' が得られる．この公理は観測の**反復可能性**を前提しているのである．

固有値 a' に縮退がないとすれば，観測の直後に対象たる系は $\hat{A}$ の固有状態 $|a'\rangle$ にあることになる†．状態 $|\psi\rangle$ が観測により $\hat{A}$ の固有状態の1つにうつるの

† 固有値 a' に縮退がある場合のことは後に(4.6.11)のところで説明する．

は，どの固有状態にうつるかが確率的にのみ定まる非因果的なもので，**波束の収縮**とよばれる．

しかし，観測には破壊的なものもある．たとえば，電子がGeiger計数管を鳴らせば，その時刻に電子が計数管のなかにいたことはいえるから，これは位置の観測にはちがいないが，その瞬間には計数管のなかに電子のなだれがおこっているので，観測の対象としたつもりの電子は見失われてしまう．観測の公理は破壊的でない観測手段の存在を仮定していることになる．

観測の直後に再び同じ観測量の観測が行えるのでないと観測の公理は意味をなさないというわけだが，このことはまた観測が**瞬間的**に，任意に短かい時間で行えることを前提している．波束の収縮も瞬間的におこることになり，この意味でも非因果的である．もともと，量子力学的な状態とは1つの瞬間に関わる概念であった．こうしたことは場の量子論に進むとき問題にならざるを得ないだろう．

場の量子論は粒子の生成消滅を許すが，そこまでゆくと，任意の自己共役演算子に対して観測手段が存在するとはいえないことがわかってくる．観測の公理を観測量の言葉で述べ自己共役演算子といわなかったのは，このためである．実際，場の量子論の状態空間には電子が1個ある状態 $|e^-\rangle$ も陽電子1個の状態 $|e^+\rangle$ も存在するが，これらの重ね合せ $\alpha|e^-\rangle+\beta|e^+\rangle$ に当る状態が観測されたことは決してないのである．このようなベクトルへの射影演算子は自己共役であるが，それを観測する手段はないとしなければならない．もしあれば，その観測によって状態 $\alpha|e^-\rangle+\beta|e^+\rangle$ が作りだされることになるからである．

読者は疑問をだすだろう．そのような状態が観測されたことがなくても，それが原理的にないとは言えない，と．たしかに，言えるのは，電荷の固有状態は――電荷の保存則が厳密なので――どんなことがあっても固有状態でなくなることはないということまでである．しかし，この事実があるので，“自然界に存在する状態および観測によってそこから作りだされる状態は電荷の固有状態にかぎる(電荷に関する**超選択則**)”という命題は理論的にも許容し得る．そして，これは経験上のことになるが，この命題はいまだかつて破れたことがない．なにかの理由で，この宇宙はそもそもの開闢のとき電荷の固有状態に創られたのだろう．

超選択則は，このように重ね合せの原理を制約する．電荷のほかにも重粒子数や軽粒子数の保存に関わるものがあるし，そう思ってみれば，非相対論的の量子

力学の範囲でも角運動量の大きさが整数の状態と半整数の状態の重ね合せがないことは超選択則の例といえる.

a) 純粋状態

観測量に対してさきに述べたような観測手段が存在するとしても，一般には1つの観測量を観測しただけでは対象の状態は定まらない. §4.4 の b) で定義した極大観測量(可換な観測量の完全な組)の全体を同時に観測しなければならないのである.

極大観測量を $\{\hat{A}_s\}_{s=1,\cdots,h}$ とし，この全体を時刻 $t=0$ に同時に観測して観測値の組 $\{\lambda_s\}_{s=1,\cdots,h}$ を得たとしよう. これで対象の状態を

$$|\psi(0)\rangle = |\lambda_1, \cdots, \lambda_h\rangle \tag{4.6.1}$$

に**用意**したことになる. '用意する' は Dirac によれば prepare で，この言葉には '調製する' の含みがある. この状態ベクトルは規格化してあるものとしよう.

観測のあと，対象の状態は (4.6.1) から Schrödinger 方程式に従って時間発展する. (4.5.20) によれば

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle. \tag{4.6.2}$$

そこで，時刻 $t>0$ に，なにかある観測量 $\hat{B}_1$ の観測をしたらどうなるか? 得られる観測値は $\hat{B}_1$ の固有値 $\xi_1{}^{(k)}$, $k=1,2,\cdots$ のどれかであるが，どれが得られるかは確率でもって予言できるだけである. 固有値は仮に離散的とした.

いま，どの固有値にも縮退がないとしよう. $\hat{B}_1$ の固有ベクトルは各固有値に対応して $|\xi_1{}^{(k)}\rangle$ と書ける. これは規格化してあるものとする. このとき，$\hat{B}_1$ の観測により特定の観測値 $\xi_1{}^{(k)}$ が得られる確率は——いいかえれば状態 $|\psi(t)\rangle$ が観測により $|\xi_1{}^{(k)}\rangle$ に波束の収縮をおこす確率は

$$\mathrm{Prob}(\xi_1{}^{(k)}) = |\langle\xi_1{}^{(k)}|\psi(t)\rangle|^2 \tag{4.6.3}$$

であたえられる. これはベクトル $|\psi(t)\rangle$ の $|\xi_1{}^{(k)}\rangle$ 方向への成分の絶対値2乗である. $\langle\xi_1{}^{(k)}|\psi(t)\rangle$ を状態 $|\psi(t)\rangle$ に状態 $|\xi_1{}^{(k)}\rangle$ が含まれることの**確率振幅**という. これは §4.3 b) でも触れたように展開

$$|\psi(t)\rangle = \sum_k |\xi_1{}^{(k)}\rangle\langle\xi_1{}^{(k)}|\psi(t)\rangle \tag{4.6.4}$$

の展開係数である.

もし $\hat{B}_1$ の固有値に縮退があるなら，一般に固有値 $\xi_1{}^{(k)}$ の固有空間への射影演算子を $\hat{P}_{\xi_1{}^{(k)}}$ として

$$\mathrm{Prob}(\xi_1{}^{(k)}) = \|\hat{P}_{\xi_1{}^{(k)}}|\psi(t)\rangle\|^2 \tag{4.6.5}$$

(4.6.3)は，もちろん，これの特別の場合である．追加のラベルを用いて $\hat{B}_1$ の固有ベクトルの完全正規直交系 $\{|\xi_1{}^{(k)}, \nu_1{}^{(n)}\rangle\}$ をつくっておけば，(4.6.4)に相当して

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{k=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{N(k)} |\xi_1{}^{(k)}, \nu_1{}^{(n)}\rangle\langle\xi_1{}^{(k)}, \nu^{(n)}|\psi(t)\rangle \tag{4.6.6}$$

という展開ができ，(4.6.5)は

$$\mathrm{Prob}(\xi_1{}^{(k)}) = \sum_{n=1}^{N(k)} |\langle\xi_1{}^{k}, \nu^{(n)}|\psi(t)\rangle|^2 \tag{4.6.7}$$

となる．

演算子 $\hat{B}_1$ は，射影演算子 $\{\hat{P}_{\xi_1{}^{(k)}}\}$ をもちいて

$$\hat{B}_1 = \sum \xi_1{}^{(k)}\hat{P}_{\xi_1{}^{(k)}} \tag{4.6.8}$$

と書けるので，$\hat{B}_1$ を観測して得る観測値の期待値は

$$\langle\hat{B}_1\rangle \equiv \sum_{k=1}^{\infty} \xi_1{}^{(k)}\|\hat{P}_{\xi_1{}^{(k)}}|\psi(t)\rangle\|^2 = \langle\psi(t)|\hat{B}_1|\psi(t)\rangle \tag{4.6.9}$$

となる．ここで射影演算子の性質(4.2.3)をもちいた．

$\hat{B}_1$ のほかに，これと交換するような観測量 $\hat{B}_2$ があれば，これらを同時に観測することができる．$\hat{B}_2$ の固有値を $\xi_2{}^{(l)}$，$l=1, 2, \cdots$ とし対応する固有空間への射影演算子を $\hat{P}_{\xi_2{}^{(l)}}$ とすれば，同時観測によって観測値の組 $\xi_1{}^{(k)}, \xi_2{}^{(l)}$ を得る確率は

$$\mathrm{Prob}(\xi_1{}^{(k)}, \xi_2{}^{(l)}) = \|\hat{P}_{\xi_1{}^{(k)}}\hat{P}_{\xi_2{}^{(l)}}|\psi(t)\rangle\|^2 \tag{4.6.10}$$

である．2つの射影演算子は交換するので(4.6.10)に書くとき順序はどうでもよい．この公式は，もっと多くの交換する観測量を同時観測する場合にも拡張される．そして，極大観測量をなすだけ十分に多くの $\{\hat{B}_r\}_{r=1,\cdots,h}$ を同時観測すると $\hat{P}_{\xi_1{}^{(k)}}\cdots\hat{P}_{\xi_h{}^{(m)}}|\psi(t)\rangle$ が1つのベクトルとして確定し，これが観測直後の系の状態(波束の収縮！)ということになる．すぐ後で明らかとなる理由により，ベクトルで表される状態を**純粋状態**とよぶ．

b) 混合状態

極大観測量をなすには不十分な数の観測量しか同時観測しなかったら，観測直後の状態はどうなるのか？

たとえば，$\hat{B}_1$ の観測をして観測値 $\xi_1{}^{(k)}$ を得たとき，これが縮退していたら，

観測直後の状態はベクトルでは表せない．縮退している $|\xi_1{}^{(k)}, \nu_1{}^{(n)}\rangle$ $(n=1, 2, \cdots, N(k))$ のどれという理由もないからである．

いま $\hat{B}_1$ と交換する $\hat{B}_2$ をとる．$\hat{B}_1$ の観測で観測値 $\xi_1{}^{(k)}$ を得，その直後に $\hat{B}_2$ を観測して観測値 $\xi_2{}^{(l)}$ を得る確率は，同時観測で観測値の組 $\xi_1{}^{(k)}, \xi_2{}^{(l)}$ を得る確率(*4.6.10*)に等しいとしてよかろう．そうすれば，最初の $\hat{B}_1$ の観測で $\xi_1{}^{(k)}$ を得たとして，それを知って直後の $\hat{B}_2$ の観測で $\xi_2{}^{(l)}$ を得る確率は

$$\mathrm{Prob}\,(\xi_2{}^{(l)}|\hat{B}_1=\xi_1{}^{(k)}) = \|\hat{P}_{\xi_2{}^{(l)}}\hat{P}_{\xi_1{}^{(k)}}|\psi(t)\rangle\|^2/\|\hat{P}_{\xi_1{}^{(k)}}|\psi(t)\rangle\|^2 \qquad (4.6.11)$$

となる．最初の $\hat{B}_1$ の観測値 $\xi_1{}^{(k)}$ を知ったとき，直後の $\hat{B}_2$ の観測に対する期待値は

$$\langle\hat{B}_2\rangle_{B_1=\xi_1{}^{(k)}} = \langle\psi(t)|\hat{P}_{\xi_1{}^{(k)}}\hat{B}_2\hat{P}_{\xi_1{}^{(k)}}|\psi(t)\rangle/\|\hat{P}_{\xi_1{}^{(k)}}|\psi(t)\rangle\|^2 \qquad (4.6.12)$$

となる．とくに $\hat{B}_2=\hat{B}_1$ にとってみると，これらの式は正しく観測の反復可能性を表す．

$\hat{B}_1$ の観測直後の状態は，だから，$\hat{B}_1$ と交換する任意の $\hat{B}_2$ に対して(*4.6.11*)，(*4.6.12*)がでてくるようなものでなければならない．それは，**密度行列**とよばれる演算子

$$\hat{\rho}_{\xi_1{}^{(k)}} = C^{-1}\sum_{n,n'}|\xi_1{}^{(k)}, \nu_1{}^{(n)}\rangle\langle\xi_1{}^{(k)}, \nu_1{}^{(n)}|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|\xi_1{}^{(k)}, \nu_1{}^{(n')}\rangle\langle\xi_1{}^{(k)}, \nu_1{}^{(n')}| \qquad (4.6.13)$$

で表される．ただし

$$C \equiv \sum_{n=1}^{N(k)}|\langle\xi_1{}^{(k)}, \nu_1{}^{(n)}|\psi(t)\rangle|^2 = \|\hat{P}_{\xi_1{}^{(k)}}|\psi(t)\rangle\|^2 \qquad (4.6.14)$$

により，

$$\mathrm{tr}\,\hat{\rho}_{\xi_1{}^{(k)}} = 1 \qquad (4.6.15)$$

に規格化してある．この密度行列で表されている状態で，たとえば $\hat{B}_2$ の測定をしたとき得られる測定値の期待値は $\mathrm{tr}[\hat{\rho}_{\xi_1{}^{(k)}}\hat{B}_2]$ で与えられるのである．計算してみると

$$\begin{aligned}&\mathrm{tr}\,[\hat{\rho}_{\xi_1{}^{(k)}}\hat{B}_2]\\ &\quad = C^{-1}\sum_{n,n'}\langle\psi(t)|\xi_1{}^{(k)}, \nu_1{}^{(n')}\rangle\langle\xi_1{}^{(k)}, \nu_1{}^{(n')}|\hat{B}_2|\xi_1{}^{(k)}, \nu_1{}^{(n)}\rangle\langle\xi_1{}^{(k)}, \nu_1{}^{(n)}|\psi(t)\rangle\end{aligned}$$

となって，結果は確かに(*4.6.12*)に一致する．$\hat{B}_2$ のかわりに $\hat{P}_{\xi_2{}^{(l)}}$ をおけば，$\mathrm{tr}\,[\hat{\rho}_{\xi_1{}^{(k)}}\hat{P}_{\xi_2{}^{(l)}}]$ は(*4.6.11*)に一致する．密度行列で表される状態を**混合状態**とよぶ．

(4. 6. 13)で，もし固有値$\xi_1^{(k)}$の状態に縮退がなかったら$|\xi_1^{(k)}, \nu_1^{(n)}\rangle$の追加のラベル$\nu_1^{(n)}$が不要で$\hat{\rho}_{\xi_1^{(k)}} = |\xi_1^{(k)}\rangle\langle\xi_1^{(k)}|$となる．このように‘1行1列の’密度行列は特別に純粋状態を表す．

観測直後に系が混合状態になるという場合が，もう1つある．それは，対象たる力学系のコピーをたくさん($\mathcal{N}$個)用意して，それぞれに極大観測量$\{\hat{B}_r\}_{r=1,\cdots,h}$の観測をする場合である．観測の結果，この集団の各系は純粋状態になるが，どの純粋状態になるかは確率的であってコピーごとにちがうだろう．全体のうち$\mathrm{Prob}(\xi_1^{(k)}, \cdots, \xi_h^{(m)})\cdot\mathcal{N}$個は純粋状態$|\xi_1^{(k)}, \cdots, \xi_h^{(m)}\rangle$となり，$\mathrm{Prob}(\xi_1^{(k')}, \cdots, \xi_h^{(m')})\cdot\mathcal{N}$個は…というぐあい．こうした集団の状態を密度行列

$$\hat{\rho}_{\text{集団}} = \sum_{k,\cdots,m} |\xi_1^{(k)}, \cdots, \xi_h^{(m)}\rangle |\langle\xi_1^{(k)}, \cdots, \xi_h^{(m)}|\psi(t)\rangle|^2 \langle\xi_1^{(k)}, \cdots, \xi_h^{(m)}| \tag{4.6.16}$$

で表しておけば，$\mathrm{tr}\,\hat{\rho}_{\text{集団}} = 1$だが，$\{\hat{B}_r\}_{r=1,\cdots,h}$の観測をした直後に集団の各系に対して観測量$\hat{X}$の観測を行って得る観測値の集団平均が

$$\langle\hat{X}\rangle_{\text{集団}} = \mathrm{tr}\,[\hat{\rho}_{\text{集団}}\hat{X}] \tag{4.6.17}$$

と書けることになる．(4. 6. 16)は，対角的だという意味で(4. 6. 13)の特別の場合とみることができる．

混合状態(4. 6. 13)は時刻tでの観測によりつくられたものだから$\hat{\rho}_{\xi_1^{(k)}}(t)$と書けば，それからさらに時間$t'-t$がたつと

$$\hat{\rho}_{\xi_1^{(k)}}(t') = e^{-i\hat{H}(t'-t)/\hbar}\hat{\rho}_{\xi_1^{(k)}}(t)e^{i\hat{H}(t'-t)/\hbar} \tag{4.6.18}$$

になる．(4. 6. 16)についても同様である．この新しい状態について新しい観測を行ったらどんな結果が得られるか．これは読者に考えていただこう．

量子力学的な系に対して行う観測には，この節のはじめに述べたもののほかにも多くの問題がある．本講座第4巻『量子力学II』で，あらためて詳しく論ずることにしたい．

第 III 部　量子力学の展開

第5章　典型的な状態の構造

この章の目標は，前章に述べた量子力学の形式を簡単な力学系に適用し，その典型的な状態をみることにより，いくつかの重要な物理的概念を導くことである．

力学系が与えられたとき，この章で考える状態は，1つの極大観測量の固有ベクトルで表されるものである．その全体が系の Hilbert 空間の正規直交基底を与え，これの重ね合せで任意の状態が表せる．

極大観測量としては，考える系のハミルトニアンを含むもの $\{A_1, A_2, \cdots, H\}$ をとることにしよう．そうすると固有ベクトルはすべて定常状態を表すことになる．この種の極大観測量は保存量であり，その固有値は**良い量子数**とよばれる．

なお本章以降では，とくに必要のない限り，演算子記号 ^ を落とすことにするが混乱はないと思う．

§5.1　対称性と保存量

1つの力学系が与えられたとき，そのハミルトニアンと組んで極大観測量をつくる観測量は，どうしたら見つけられるか？　もし時間をあらわに含まないものに限れば，それらは保存量でなければならない：

$$[H, A_s] = 0.$$

では，保存量はどうしたら見つかるだろうか？　そのために系の対称性が手がかりになる．

力学系が**対称性**をもつというのは，その系のハミルトニアンが力学変数の何かの変換に対して不変なことである．対称性を考えるための変換を対称操作ともいう．もし，力学変数 F の変換が $F \to F' = UFU^{-1}$ の形に書けるなら，ハミルトニアンの不変性

$$UHU^{-1} = H$$

は，右から U をかければわかるとおり

$$[H, U] = 0 \tag{5.1.1}$$

を与え，U が保存量であることを示す．

とくに，変換が自己共役な演算子 A と実軸上を動くパラメーター α とにより

$$F \longrightarrow F_\alpha = e^{i\alpha A/\hbar} F e^{-i\alpha A/\hbar} \tag{5.1.2}$$

と書けるなら，この変換は連続群をなす．A をその**生成演算子**という．(4.5.4) でハミルトニアンを時間推進の生成演算子とよんだのと同様である．詳しい説明は第8章にゆずろう．(5.1.2) の両辺を α で微分して

$$\frac{d}{d\alpha}F_\alpha = -\frac{i}{\hbar}[F_\alpha, A]. \tag{5.1.3}$$

ハミルトニアンが連続変換 (5.1.3) で不変なこと，すなわち

$$e^{i\alpha A/\hbar} H e^{-i\alpha A/\hbar} = H$$

は，(5.1.3) により

$$[H, A] = 0 \tag{5.1.4}$$

と同値である．(5.1.1) が，連続変換の場合，このように生成演算子の保存にいいかえられる．

つまり (5.1.4) を2通りに読んでいる．A を対称操作の生成演算子とみれば，(5.1.4) はハミルトニアンがその対称操作で不変なこと (対称性) と読める．他方，H が時間推進の生成演算子であることに注目すれば，(5.1.4) は A が時間がたっても変わらないこと (保存) と読める．両者の同値は当然である．

ハミルトニアンを不変にする対称操作は視察によって見つけられる場合が多いから，これで保存量が見つかるのは極大観測量を構成するのによい手がかりになる．

例を示そう．以下，とくに断わらないかぎり3次元空間を動く1質点の問題を考え，その運動量演算子を $\boldsymbol{p}$, 座標演算子を $\boldsymbol{r}$ とする．

a) 連続群の場合——並進と回転

座標軸を自身に平行に移動することを**並進**という．座標が $\boldsymbol{r}$ であった点は，座標系を $-\boldsymbol{a}$ だけ並進したあとには，座標 $\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}$ をもつようになる．運動量は変わらない:

$$\boldsymbol{r}_a = \boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}, \qquad \boldsymbol{p}_a = \boldsymbol{p}. \tag{5.1.5}$$

並進の生成演算子は運動量である．これは(5.1.3)に相当する式

$$\frac{d}{da_x}x_a = 1 = -\frac{i}{\hbar}[x_a, p_x], \qquad \frac{d}{da_x}p_{ax} = 0 = -\frac{i}{\hbar}[p_{ax}, p_x]$$

等々からも知れるし，(4.4.4)から

$$e^{ip_xa_x/\hbar}xe^{-ip_xa_x/\hbar} = x+a_x \tag{5.1.6}$$

が得られることからもわかる．これは x 軸の方向への並進を考えたことになるが，一般に $\boldsymbol{a}$ を (a_x, a_y, a_z) としたときの並進は，各方向への並進をつづけて行えばよい．並進といえば，方向，向きのいろいろにちがったもの，大きさのちがったものがあって，全体は連続無限個になるが，生成演算子としては p_x, p_y, p_z の3個を考えておけばよいのである．これは並進という対称操作の群論的な構造による(第8章を参照)．

ここでは，読者は，運動量の成分同士が可換なため

$$e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar} = e^{ip_xa_x/\hbar}e^{ip_ya_y/\hbar}e^{ip_za_z/\hbar} \tag{5.1.7}$$

となること，そのおかげで

$$\left.\begin{aligned} T_a\boldsymbol{r}T_a^* &= \boldsymbol{r}+\boldsymbol{a} \\ T_a\boldsymbol{p}T_a^* &= \boldsymbol{p} \end{aligned}\right\} \qquad (T_a \equiv e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}) \tag{5.1.8}$$

が得られることを確かめよ．

この結果をもちいると，$\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}$ の関数であるハミルトニアンについて

$$e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar}H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar} = H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}).$$

まったく同じ形の式が任意の関数について成り立つ．

もし，与えられた力学系が並進対称なら，並進の生成演算子である運動量が H と可換であり，逆も真である：

$$H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}) = H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}) \quad \Leftrightarrow \quad [\boldsymbol{p}, H] = 0. \tag{5.1.9}$$

並進対称かどうかは，与えられた力学系を見ればすぐわかり，それだけで $\boldsymbol{p}$ と H の可換，非可換が判断できる．もし可換なら，$\boldsymbol{p}$ は保存量となり良い量子数を与える．ハミルトニアンが

$$H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}) = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + V(\boldsymbol{r})$$

の形をしている場合，その並進対称性は $V(\boldsymbol{r})=\text{const.}$ にほかならないから，運動量が保存されることは量子力学における慣性の法則といえる．N 個の粒子から

なる多粒子系で，各粒子の座標と運動量をそれぞれ $\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{p}_i\,(i=1, \cdots, N)$ とするとき，粒子間のポテンシャルが座標の差だけの関数であるなら，すなわち

$$H=\sum_i \frac{1}{2m_i}\boldsymbol{p}_i{}^2+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V_{ij}(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)$$

ならば，全運動量

$$\boldsymbol{P}\equiv\sum_i \boldsymbol{p}_i$$

が保存されることを，読者は上の論法によって説明せよ．

つぎに，座標系の**回転**を考えよう．

座標系を原点をとおる軸のまわりに微小角 ϕ だけまわすと，ベクトルは成分が変わり，座標と運動量がそれぞれ

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{r}_\phi&=\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\phi}\times\boldsymbol{r}+O(\phi^2)\\ \boldsymbol{p}_\phi&=\boldsymbol{p}+\boldsymbol{\phi}\times\boldsymbol{p}+O(\phi^2)\end{aligned}\right\}\qquad(5.\,1.\,10)$$

で表されるようになる(図5.1)．ただし，回転軸の方向にあって，回転の向きにまわした右ネジの進む向きをもち，大きさがラジアン単位で測った回転角 ϕ に等しいベクトルを $-\boldsymbol{\phi}$ と記した．

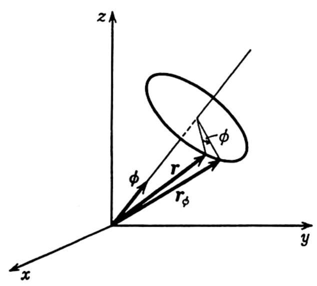


図5.1　座標系の回転 $-\boldsymbol{\phi}$ は，すべてのベクトルの回転 $\boldsymbol{\phi}$ と同じことである

回転の生成演算子は，角運動量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ である．実際，$\boldsymbol{\phi}$ を無限小として $\boldsymbol{\eta}=\boldsymbol{\phi}/\hbar$ とおき，$e^{i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{L}}\boldsymbol{r}e^{-i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{L}}$ を指数関数の定義(4.4.2)によって計算すると

$$\begin{aligned}(1+i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{L})\boldsymbol{r}(1-i\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{L})&=\boldsymbol{r}+i[\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{L},\boldsymbol{r}]+O(\phi^2)\\ &=\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\phi}\times\boldsymbol{r}+O(\phi^2)\end{aligned}\qquad(5.\,1.\,11)$$

となって(5.1.10)に一致し，$\boldsymbol{p}$ についても同様，ということである．スカラー積 $\boldsymbol{\phi}\cdot\boldsymbol{L}/\hbar$ がでてきた点は(5.1.8)に $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{a}/\hbar$ があるのと同じだ．(5.1.11)を確かめるには，α, β, γ などがそれぞれ x, y, z 成分を表す添字だとして，ベクトル積の成分が，簡便に

$$L_\alpha=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\beta p_\gamma \qquad (5.\,1.\,12)$$

のように書けることに注意するとよい．ここに $x_x\equiv x$，$x_y\equiv y$，$x_z\equiv z$ で，$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ は (α, β, γ) が (x, y, z) の偶置換なら $+1$，奇置換なら -1，その他の場合は0という

値をとるものとし，2度くりかえされている添字については x, y, z にわたる和をとる．この記法によれば

$$[L_\alpha, x_\lambda] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}[x_\beta p_\gamma, x_\lambda] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\beta(-i\hbar\delta_{\gamma\lambda})$$
$$= -i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\lambda}x_\beta = i\hbar\varepsilon_{\alpha\lambda\beta}x_\beta \qquad (5.1.13)$$

となるので，$\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{L}=\eta_\alpha L_\alpha$ にたいしては

$$i[\boldsymbol{\eta}\cdot\boldsymbol{L}, x_\lambda] = \hbar\varepsilon_{\alpha\beta\lambda}\eta_\alpha x_\beta = \varepsilon_{\lambda\alpha\beta}\phi_\alpha x_\beta$$

は $\boldsymbol{\phi}\times\boldsymbol{r}$ の λ 成分にほかならず，(5.1.11)が得られる．読者は，運動量の変換を計算せよ．

こうして角運動量は回転の生成演算子であることがわかったので，(5.1.9)に相当して，

$$H(\boldsymbol{p}_\phi, \boldsymbol{r}_\phi) = H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}) \quad \Leftrightarrow \quad [\boldsymbol{L}, H]=0. \qquad (5.1.14)$$

つまり，回転対称性をもつ力学系においては角運動量が保存量である．

しかし，その場合でも，角運動量の3つの成分がすべて良い量子数を与えるわけではない．この点，運動量とちがっている．それは，運動量の成分がたがいに可換であるのに対して，角運動量の成分は非可換で，3成分のすべてを極大観測量に含めるわけにいかないからである．ついでにいえば，この非可換性のために(5.1.7)に相当する式も角運動量に対しては成り立たない．

この非可換性は，考えてみれば当然のことだ．交換関係 $[L_\alpha, L_\beta]$ は α 軸のまわりに無限小回転を行ったときの L_β の変化を表す．角運動量はベクトルなのだから，座標軸を回転すれば――$\alpha=\beta$ でないかぎり――成分 β は変化するので $[L_\alpha, L_\beta]\neq 0$ でなければならない．さらにいえば，一般にベクトル成分の変換は(5.1.10)の形をとるから，交換関係は(5.1.13)と同じ形

$$[L_\alpha, L_\beta] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\lambda}L_\lambda \qquad (5.1.15)$$

になるはずである．読者は，これを確かめよ．

角運動量の場合，3成分すべてを極大観測量に含めることはできない．では，どうすべきか．この問題は次の節で考えることにしよう．

b）離散的な変換群――空間反転

すべての座標軸の向きを反対にすると，右手系は左手系に変わる．座標も運動量も符号が変わり

$$\boldsymbol{r}_\pi = -\boldsymbol{r}, \qquad \boldsymbol{p}_\pi = -\boldsymbol{p} \qquad (5.1.16)$$

となるが，角運動量はそのままである：

$$L_\pi = r_\pi \times p_\pi = (-r) \times (-p) = L.$$

対称操作(*5. 1. 16*)を**空間反転**という†．空間反転を行う，行わないの2つを元として離散的な変換群ができる．

空間反転をすると，波動関数 ψ は，もと座標が $\boldsymbol{r}$ の点でとっていた値を，こんどは座標が $\boldsymbol{r}_\pi$ の点でとることになる．これは新しい関数だから ψ_π と書くことにすれば，$\psi_\pi(\boldsymbol{r}_\pi)=\psi(\boldsymbol{r})$．すなわち

$$\psi_\pi(\boldsymbol{r}) = \psi(-\boldsymbol{r}).$$

関数 ψ から ψ_π への変換は1対1だから，これで演算子 $\mathcal{P}$ を定義することができる．空間反転の演算子である：

$$(\mathcal{P}\psi)(\boldsymbol{r}) = \psi(-\boldsymbol{r}) \qquad (5.1.17)$$

この演算子は，$\mathcal{P}^2=1$ という性質をもち，任意の φ, ψ に対し，

$$\langle \mathcal{P}\varphi, \psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz \varphi^*(-x, -y, -z)\psi(x, y, z)$$

で $x_\pi=-x$ などに変数変換すれば

$$\langle \mathcal{P}\varphi, \psi\rangle = \langle \varphi, \mathcal{P}\psi\rangle$$

となるから Hermite 的 $\mathcal{P}^\dagger=\mathcal{P}$ であり，したがってまたユニタリーでもある：

$$\mathcal{P}^\dagger\mathcal{P} = \mathcal{P}\mathcal{P}^\dagger = \mathcal{P}^2 = 1.$$

(*5. 1. 17*)では波動関数の変換を考えたので，いわば Schrödinger 描像に類する．これから Heisenberg 描像に類するものに移ると考えれば，(*5. 1. 16*)は

$$\mathcal{P}^{-1}\boldsymbol{r}\mathcal{P} = -\boldsymbol{r}, \qquad \mathcal{P}^{-1}\boldsymbol{p}\mathcal{P} = -\boldsymbol{p} \qquad (5.1.18)$$

と書かれる．$\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{r}$ の関数，たとえばハミルトニアンに対しては

$$\mathcal{P}^{-1}H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r})\mathcal{P} = H(-\boldsymbol{p}, -\boldsymbol{r}).$$

したがって，

$$H(-\boldsymbol{p}, -\boldsymbol{r}) = H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}) \quad \Leftrightarrow \quad [\mathcal{P}, H] = 0. \qquad (5.1.19)$$

こうして，またも対称性と可換性の同値が見出された．

空間反転 $\mathcal{P}$ の固有値は，§2.3で説明したパリティである．ハミルトニアンが空間反転不変ならば，パリティが保存される．よい量子数になるのは，採用する極大観測量のなかに運動量のような空間反転不変でない観測量が含まれていない

† §2.3で導入した．

場合である．

離散的な対称操作の例としては，ほかにも同種粒子の多体系における粒子の番号のつけかえ（置換群）がある．これについては§8.10で述べられるだろう．同じく離散的な変換である時間反転については§5.3で述べる．

§5.2 角運動量

角運動量は量子力学のいろいろの分野で基本的な役割を果たす．いうまでもなく，空間の等方性の反映である．

ここしばらく角運動量演算子を $\boldsymbol{J}$ と書く．その理由はやがて明らかになる．前節で得た交換関係(5.1.15)を書き下せば

$$\left.\begin{array}{c}[J_x, J_y] = i\hbar J_z \\ [J_y, J_z] = i\hbar J_x, \qquad [J_z, J_x] = i\hbar J_y\end{array}\right\} \tag{5.2.1}$$

これらは，どれか1つから x, y, z を循環的にかえることで他のすべてが得られる．

角運動量の成分は，このようにたがいに可換でないから，どの2つも同時に対角化することができない．角運動量は回転の生成演算子であったから，回転不変な観測量とは可換なはずである．たとえば，自身とのスカラー積

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \tag{5.2.2}$$

がどの成分とも可換なことは，(5.1.15)をもちいて容易にたしかめられる．実際

$$\begin{aligned}[J_\alpha, J_\beta J_\beta] &= [J_\alpha, J_\beta]J_\beta + J_\beta[J_\alpha, J_\beta] \\ &= i\hbar\{\varepsilon_{\alpha\beta\lambda}J_\lambda J_\beta + \varepsilon_{\alpha\beta\lambda}J_\beta J_\lambda\}\end{aligned}$$

の最右辺は，第2項で β と λ をとりかえると $J_\lambda J_\beta$ でくくれて同時に $\varepsilon_{\alpha\beta\lambda}$ が $\varepsilon_{\alpha\lambda\beta} = -\varepsilon_{\alpha\beta\lambda}$ にかわるので相殺がおこり，たしかに

$$[J_\alpha, J^2] = 0 \tag{5.2.3}$$

を与える．

そこで，J^2 と J_z の同時対角化を試みよう．J_z を選んだ理由は，極座標系をもちいる際に z 軸が特別の扱いになるという程度のものでしかない．

a) J^2 と J_z の同時対角化

この a) 項にかぎり $\boldsymbol{J}$ を $\hbar$ で割ったものをあらためて $\boldsymbol{J}$ と書く（最後の(5.2.12)以下は別として）．対角化の計算には，$\boldsymbol{J}$ の各成分そのままでなく

$$\left.\begin{aligned} J_{+1} &\equiv -\frac{1}{\sqrt{2}}(J_x+iJ_y), \\ J_{-1} &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(J_x-iJ_y) \end{aligned}\right\} \tag{5.2.4}$$

と J_z とを用いるのがよい．簡便に $J_{\pm1}\equiv J_\pm$ とも書く†．J_z を J_0 と書くこともある．これらの演算子の交換関係は，(5.2.1)から

$$\left.\begin{aligned} [J_z, J_q] &= qJ_q \qquad (q=\pm1) \\ [J_{+1}, J_{-1}] &= -J_z \end{aligned}\right\} \tag{5.2.5}$$

となる．また，$\boldsymbol{J}$ の自己共役性により

$$J_{+1}^\dagger = -J_{-1}, \qquad J_z^\dagger = J_z \tag{5.2.6}$$

となることにも注意しておこう．

さて，(5.2.4)の記法では，(5.2.2)は

$$J^2 = -2J_+J_-+J_z(J_z-1) = -2J_-J_++J_z(J_z+1) \tag{5.2.7}$$

となる．これと J_z とを同時対角化したい．それが可能なことは(5.2.3)からわかっているので，ひとつの同時固有ベクトルをブラ・ケット記法で $|\lambda, m\rangle$ としよう：

$$J^2|\lambda, m\rangle = \lambda|\lambda, m\rangle, \qquad J_z|\lambda, m\rangle = m|\lambda, m\rangle \tag{5.2.8}$$

ただし，固有値 λ, m については，まだなにもわからない．

いま，$|\lambda, m\rangle$ に対して $J_q|\lambda, m\rangle$ を考えてみる $(q=\pm1)$．これも(5.2.3)により J^2 の固有ベクトルである．

$$J^2(J_q|\lambda, m\rangle) = J_q(J^2|\lambda, m\rangle) = \lambda(J_q|\lambda, m\rangle).$$

他方，J_z に対しては

$$J_z(J_q|\lambda, m\rangle) = J_qJ_z|\lambda, m\rangle+[J_z, J_q]|\lambda, m\rangle$$

として(5.2.5)を考慮すると

$$J_z(J_q|\lambda, m\rangle) = (m+q)(J_q|\lambda, m\rangle)$$

となるから，$J_q|\lambda, m\rangle$ は J_z の固有ベクトルでもあって，固有値は $|\lambda, m\rangle$ のそれと $q=\pm1$ だけちがっている．J_+, J_- は J_z の固有値を1だけ上げ下げするわけで，**昇降演算子**とよばれる．

こうして，固有ベクトル $|\lambda, m\rangle$ が1つあると，それに J_- をくりかえし作用さ

† $J_\pm\equiv(J_x\pm iJ_y)/\sqrt{2}$ とすることも多い．

せることにより J_z の固有値が1ずつ減ってゆく固有ベクトルの鎖が得られる(図5.2). この鎖は下に限りなく延びてゆくのだろうか? また J_+ を作用させて J_z の固有値を1ずつ上げてゆくこともできるが, この操作は限りなく続けられるだろうか?

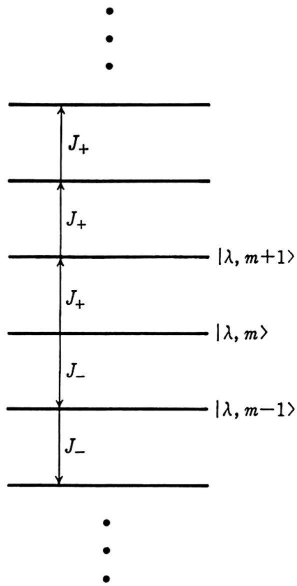


図5.2 角運動量の階段と昇降演算子

否である. それは $J_q|\lambda, m\rangle$ のノルムを計算してみるとわかる. J_q を作用させた結果がゼロ・ベクトルになれば鎖はそこで切れるのだ. 実際, (5.2.6)により

$$\|J_q|\lambda, m\rangle\|^2 = -\langle\lambda, m|J_{-q}J_q|\lambda, m\rangle$$

であるが, (5.2.7)によれば

$$-J_{-q}J_q = \frac{1}{2}[J^2 - J_z(J_z+q)]$$

だから, (5.2.8)をもちいて

$$\|J_q|\lambda, m\rangle\|^2 = \frac{1}{2}[\lambda - m(m+q)]\langle\lambda, m|\lambda, m\rangle. \tag{5.2.9}$$

ノルム2乗は非負であるから

$$\lambda - m(m\pm1) \geqq 0.$$

これは m の値に最大, 最小があることを示す. それぞれを m'', m' と記せば

$$\left.\begin{aligned} \lambda - m''(m''+1) = 0 \\ \lambda - m'(m'-1) = 0 \end{aligned}\right\} \tag{5.2.10}$$

もしも第1式が0でなかったら $|\lambda, m''\rangle$ に J_+ を作用させて $|\lambda, m''+1\rangle$ がつくれることになるからである. 第2式についても同様. こうして, 固有ベクトルの鎖は m が間隔1の階段をなし最小値 m' から最大値 m'' にいたることがわかった.

上の第2式から第1式を辺々ひくと

$$(m''+m')(m''-m'+1) = 0.$$

ところが $m''\geqq m'$ だから, この第1因子が0でなければならない. そこで

$$m'' = -m' \equiv j \tag{5.2.11}$$

とおくと (5. 2. 10) から $\lambda=j(j+1)$ となる．この j は 0 または正の整数，半整数のいずれかでなければならない．なぜなら，m は間隔 1 の階段をなしているので (5. 2. 11) が

$$2j = m''-m' = \text{正の整数} \quad \text{または} \quad 0$$

を示すからである．以下，固有ベクトルのラベルとして λ の代りに j を用いることにしよう．

こうして，ひとつの j に

$$\left.\begin{aligned} J^2|j,m\rangle &= j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle \\ J_z|j,m\rangle &= m\hbar|j,m\rangle \\ &\qquad (m=-j,\ -j+1,\cdots,\ j) \end{aligned}\right\} \tag{5.2.12}$$

という $(2j+1)$ 個の固有ベクトルの鎖が属することがわかった．j のとり得る値は，上に見たとおり

$$j=0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ \cdots \tag{5.2.13}$$

である．ただし，この項のはじめに $\boldsymbol{J}$ と略記することにした $\boldsymbol{J}/\hbar$ をもとにもどしたので (5. 2. 12) には $\hbar$ がついた．

固有ベクトルの鎖は $J_\pm$ によって生成される．(5. 2. 9) から $J_\pm|j,m\rangle$ の規格化因子が知れて，

$$\left.\begin{aligned} |j,m+1\rangle &= -\left[\frac{2}{(j-m)(j+m+1)}\right]^{1/2}\hbar^{-1}J_+|j,m\rangle \\ |j,m-1\rangle &= \left[\frac{2}{(j+m)(j-m+1)}\right]^{1/2}\hbar^{-1}J_-|j,m\rangle \end{aligned}\right\} \tag{5.2.14}$$

実は (5. 2. 9) だけでは規格化因子の位相までは決まらない．それを，便宜上この (5. 2. 14) によって定義しているのである．といっても，これは j が同じで m だけ異なる $|j,m\rangle$ 同士の相対位相までしか決めていない．j がちがう固有ベクトルの位相関係は，後の d) 項で角運動量の合成をあつかうときに定める．もちろん，(5. 2. 14) の 2 つの式の位相の定義は独立ではない．第 1 式をブラにうつすと，右辺に $\langle j,m|J_+{}^\dagger$ が現れるから (5. 2. 6) をもちい

$$\langle j,m+1| = \left[\frac{2}{(j-m)(j+m+1)}\right]^{1/2}\hbar^{-1}\langle j,m|J_-\,.$$

これにケット $|j,m+1\rangle$ をかけて，$J_-|j,m+1\rangle$ は $|j,m\rangle$ の定数倍であることを

考慮すれば，その定数が定まり

$$|j,m\rangle=\left[\frac{2}{(j-m)(j+m+1)}\right]^{1/2}\hbar^{-1}J_-|j,m+1\rangle$$

が得られる．ここで m を $m-1$ におきなおしたものが(5.2.14)の第2式にほかならない．

固有ベクトル $|j,m\rangle$ は，角運動量 $\boldsymbol{J}$ の大きさが $\sqrt{j(j+1)}\hbar$，z 成分が $m\hbar$ に確定した状態を表す．

m が最大値 j をとるときに角運動量は最も z 軸に近く向くが，このときでも z 成分がベクトルの大きさ $\sqrt{j(j+1)}\hbar$ に達しないのは，交換関係(5.2.1)のために x, y 成分が確定値をとり得ず，常にゆらいでいるためである(図5.3)．ただし，$j=0$ の場合だけは例外であって，状態 $|0,0\rangle$ では角運動量のすべての成分が確定値0をとる．

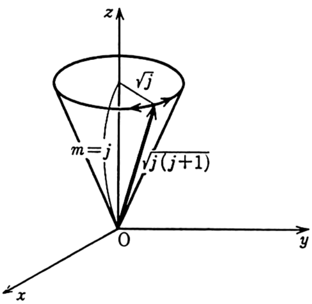


図5.3 $m=j$ の状態における角運動量のゆらぎ．角運動量ベクトルの大きさは $\hbar$ を単位に示す．図は $j=4$ の場合．

m の値が間隔1で $(2j+1)$ 個のとびとびの値しかとらないことは，角運動量ベクトルの向きが，図5.4に例示するような開き角のとびとびな円錐面上に束縛さ

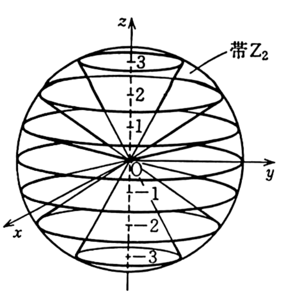


図5.4 方向量子化．角運動量が'歳差運動'をして球面から切りとる環状の帯を順に各 m の値にわりあてると，どの帯 Z_m の面積もたがいに等しくなる．このことは，統計的に，どの m も等しいアプリオリ確率をもつことに照応している．とくに，古典統計力学への極限を考えるときには重要な事実である．図は $j=3$ の場合．

れていることを意味する．これを**方向量子化**という．x, y 成分のゆらぎのため，角運動量は，各円錐面上ではあらゆる方向を一様にとる．これをコマの歳差運動になぞらえることもあるが，角運動量は首振りの向きまで一定しているわけではない．

角運動量だけをとりだして考察しているいまの場合，z 軸を空間のどの方向にとるべき理由もないのに，方向量子化がおこったのは迷理めいてみえるだろう．

z 軸を別の方向にとって上の計算をくりかえせば，新らしい z° 軸のまわりに方向量子化がおこることになる．固有関数 $|j, m\rangle^\circ$ もちがってくるが，それは古い基底 $\{|j, m'\rangle\}_{-j\leq m'\leq j}$ の1次結合で書けるのである．実際，古い座標系 xyz から新らしい $x^\circ y^\circ z^\circ$ への回転を図5.5に示す Euler 角 α, β, γ で表すと，すぐ後に示すとおり

$$|j, m\rangle^\circ = e^{-i\alpha J_z/\hbar}e^{-i\beta J_y/\hbar}e^{-i\gamma J_z/\hbar}|j, m\rangle \tag{5.2.15}$$

となる．$\boldsymbol{J}$ のどの成分も $|j, m\rangle$ に作用するとき j の値を変えず m の値のみ変えるのだから，$|j, m\rangle^\circ$ は j の同じ古い基底 $\{|j, m'\rangle\}_{-j\leq m'\leq j}$ の1次結合である．

変換式(5.2.15)を証明しよう．図5.5の変換は

$$U = e^{-i\gamma J_{z''}/\hbar}e^{-i\beta J_{y'}/\hbar}e^{-i\alpha J_z/\hbar}$$

と書ける．ただし，$J_{y'}, J_{z''}$ は変換された軸のまわりの角運動量であって，もとの J_x, J_y, J_z で表す必要がある．y' 軸は y 軸を z 軸まわりに角 α だけ回転してできたものだから

$$J_{y'} = e^{-i\alpha J_z/\hbar}J_y e^{i\alpha J_z/\hbar}$$

と書ける．同様に

$$J_{z''} = e^{-i\beta J_{y'}/\hbar}J_{z'}e^{i\beta J_{y'}/\hbar}$$

と書けるが，$J_{z'}=J_z$ に注意し，$J_{y'}$ を上の式で J_y に直せば

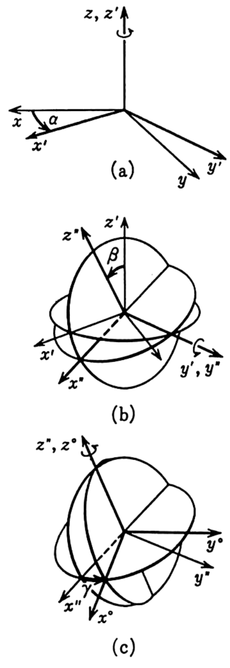


図5.5　Euler 角．(a)座標系 xyz を z 軸まわりに角 α だけ回転して $x'y'z'$ にする．(b)それを y' 軸まわりに角 β だけ回転して $x''y''z''$ にする．(c)それを z'' 軸まわりに角 γ だけ回転して座標系 $x^\circ y^\circ z^\circ$ を得る．

$$J_{z''} = (e^{-i\alpha J_z/\hbar}e^{-i\beta J_y/\hbar}e^{i\alpha J_z/\hbar})\,J_z\,(e^{-i\alpha J_z/\hbar}e^{i\beta J_y/\hbar}e^{i\alpha J_z/\hbar})$$

よって

$$e^{-i\gamma J_{z''}/\hbar} = e^{-i\alpha J_z/\hbar}e^{-i\beta J_y/\hbar}e^{-i\gamma J_z/\hbar}e^{i\beta J_y/\hbar}e^{i\alpha J_z/\hbar}$$

を得る．これと上の $J_{y'}$ の式からつくった $e^{-i\beta J_{y'}}$ とをさきの U の表式に代入すれば，(5.2.15)の証明がおわる．変換(5.2.15)は後に(5.2.43)で利用する．

方向量子化といっても，それは J^2, J_z を対角化するようにつくった基底についてのことで，角運動量がアプリオリに特別の方向にかぎられるわけではない．

b) 軌道角運動量，球関数

軌道角運動量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ の演算子を極座標表示で書き下し，その固有関数を求めてみよう．そうすれば，方向量子化にともなう存在確率密度の非等方性も目にみえるようになるだろう．

極座標 (r, θ, φ) は直角座標 (x, y, z) と

$$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$$

$$\tan\theta = \sqrt{x^2+y^2}/z, \qquad \tan\varphi = y/x$$

によって結ばれている．運動量のたとえば x 成分は

$$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar\left[\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\varphi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

のようにして極座標表示にうつされ

$$p_x = -i\hbar\left[\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

となる．他の成分も同様にして計算し，$\boldsymbol{r}$ とのベクトル積をつくれば，軌道角運動量が得られる：

$$\left.\begin{aligned}
L_x &= -i\hbar\left[-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\\
L_y &= -i\hbar\left[\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\\
L_z &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}
\end{aligned}\right\}$$

これらを演算子の順序に注意しながら2乗して和をとると，

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{5.2.16}$$

となる．(5. 2. 4) に相当する演算子は(複号同順)

$$L_{\pm} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}} e^{\pm i\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} \pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]. \qquad (5.2.17)$$

さて，前項(5. 2. 12)の固有ベクトルで，とくに $m=0$ のものをまず求めよう．これが求まると，$m\neq0$ のものは(5. 2. 14)を用いて直ちに得られる．

L^2 と L_z の固有関数は，一般に θ, φ の関数だが，$m=0$ のものは微分演算子 L_z の形から φ によらない．その関数を $P(\cos\theta)$ と書けば，L^2 についての固有値方程式は，固有値を仮に λ として

$$-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}P(\cos\theta) = \lambda P(\cos\theta)$$

となる．$\cos\theta=z$ に変数をかえると，これは Legendre の方程式

$$\left[(1-z^2)\frac{d^2}{dz^2} - 2z\frac{d}{dz} + \lambda\right]P(z) = 0 \qquad (5.2.18)$$

となる．z の変域は $[-1, 1]$ である．

この方程式は複素 z 平面上で $z=\pm1, \infty$ を確定特異点としている．一般に，$u=u(z)$ に対する 2 階の線形微分方程式

$$\frac{d^2u}{dz^2} + A(z)\frac{du}{dz} + B(z)u = 0$$

の係数 $A(z), B(z)$ の一方または両方が $z=c$ に極をもち，その点において $A_1(z) \equiv (z-c)A(z)$，$B_1(z) \equiv (z-c)^2B(z)$ が正則なとき，$z=c$ を**確定特異点**という．確定特異点の近傍では

$$\rho(\rho-1) + \rho A_1(c) + B_1(c) = 0$$

の 2 根 $\rho=\rho_1, \rho_2$ による

$$u = (z-c)^{\rho}[1 + a_1(z-c) + a_2(z-c)^2 + \cdots]$$

の形の 2 つの独立な解がある．ただし，2 根の差 $\rho_1-\rho_2$ が正整数または 0 のときは例外で $\rho=\rho_1$ の u と

$$v = k(z-c)^{\rho_1}[1 + a_1(z-c) + \cdots]\log(z-c) + (z-c)^{\rho_2}[1 + b_1(z-c) + \cdots]$$

の形の v が独立な解になる．k は 0 のこともある．

(5. 2. 18) の確定特異点 $z=1$ における指数方程式は $\rho^2=0$ なので，上の一般論から，解には $z=1$ の近傍で $(1-z)^0$ のように振舞うものと $\log(1-z)$ のようになるものとがある．

後者は，変数を θ にもどすと $\sim\log\theta$ となる．そのような解自身は2乗可積分だからいちがいに排除できないが，(5.2.17) の $L_\pm$ をかけた途端その性質が失われてしまうので，前項の一般論に照らして，これはやはり排除されねばならない．$z=-1$ の近傍についても同じことがいえる．

したがって，求める固有関数としては $z=\pm1$ の両方で正則な (5.2.18) の解をとるべきことがわかる．そのような解は

$$\lambda = l(l+1), \qquad l=0,1,2,\cdots \tag{5.2.19}$$

のときにのみ存在し，Legendre の多項式

$$P_l(z) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dz^l}(z^2-1)^l \tag{5.2.20}$$

で与えられることが知れている．これに $\sqrt{(2l+1)/4\pi}$ をかけると単位球面上で規格化され(すぐ後の (5.2.23) を見よ) 前項の $|l,0\rangle$ の表示 $\langle\cos\theta,\varphi|l,0\rangle$ になる．$\langle\theta,\varphi|l,0\rangle$ と書かないのは $d\cos\theta d\varphi$ による積分で規格化されているからである．

$m\neq0$ の固有ベクトル $|l,m\rangle$ は $|l,0\rangle$ に $L_\pm$ をくりかえしかけて構成する．その表示 $\langle\cos\theta,\varphi|l,m\rangle$ がいわゆる球関数

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi} \tag{5.2.21}$$

となることを帰納法で証明しよう．ここに

$$P_l^m(z) = (1-z^2)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{dz^{|m|}}P_l(z) \tag{5.2.22}$$

は Legendre の陪関数とよばれる．(5.2.21) は単位球面上で

$$\int_0^\pi \sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi Y_{l'm'}{}^*(\theta,\varphi)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{5.2.23}$$

という正規直交性をもつ．

なお，(5.2.22) の代りに

$$\mathcal{P}_l^m(z) = (1-z^2)^{m/2}\frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}}\frac{1}{2^l l!}(z^2-1)^l$$

という定義をとれば $\mathcal{P}_l^{-m} = (-1)^m[(l-m)!/(l+m)!]\mathcal{P}_l^m$ となり

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\mathcal{P}_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$$

と書けて，(5.2.21) にある m の絶対値記号が避けられる．

さて，帰納法による(5.2.21)の証明．まず $m=0$ では，(5.2.21)の定義は，たしかに

$$Y_{l0}(\theta, \varphi) = \langle \cos\theta, \varphi | l, 0 \rangle$$

にあっている．そこで，(5.2.14)に相当して，複号同順で

$$\mp\sqrt{\frac{2}{(l-|m|)(l+|m|+1)}}\hbar^{-1}L_{\pm}Y_{lm}(\theta, \varphi) = Y_{l,m\pm1}(\theta, \varphi) \qquad (5.2.24)$$

の成り立つことを示そう．ただし，$m\geqq0$ のとき L_+ を，$m\leqq0$ のときには L_- をかけて m の値を増減することにしてある．これで

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \cos\theta, \varphi | l, m \rangle \qquad (5.2.25)$$

が $m=0, 1, 2, \cdots$ と $m=0, -1, -2, \cdots$ に対して順次たしかめられることになる．(5.2.24)を示すには，(5.2.17)の $L_\pm$ が，$\cos\theta=z$ を変数としたとき，複号同順で

$$L_{\pm}u(z)e^{\pm i|m|\varphi} = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{\pm i(|m|+1)\varphi}(1-z^2)^{(|m|+1)/2}\frac{\partial}{\partial z}(1-z^2)^{-|m|/2}u(z)$$

と書けることに注意すればよい．u は任意である．証明おわり．

上の計算は $m=0$ の固有関数を求めることから出発したが，その代りに $m=1/2$ として出発したのでは遂行できない(どこでつまずくか？)．したがって，軌道角運動量については，L^2 と L_z の同時固有関数は(5.2.25)の形であってそれ以外にはない．L^2 と L_z の固有値は，それぞれ $l(l+1)\hbar^2, m\hbar$ である．m が $-l, -l+1, \cdots, l$ という $2l+1$ 個の値をとるのは一般論の結果(5.2.12)のとおりだが，l の値は正整数または 0 に限られる．歴史的な理由から $l=0, 1, 2, 3, \cdots$ の状態を順に s, p, d, f, … 状態とよぶ．

球関数のつぎの諸性質は量子力学のいろいろの問題を解くのに便利である．

まず，座標軸の反転(図 5.6)に対して，(5.2.21)から，

$$Y_{lm}(\pi-\theta, \pi+\varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

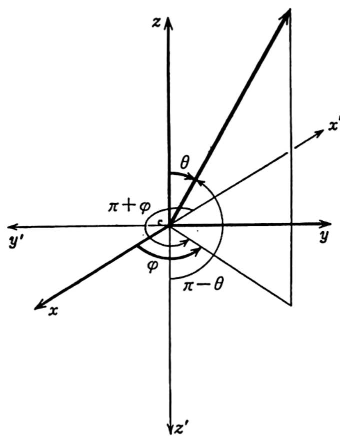


図 5.6　座標系の反転

これは軌道角運動量がパリティ $(-1)^l$ を荷うことを示す.

同じく定義(5. 2. 21)から

$$\left.\begin{aligned}\cos\theta\, Y_{lm} &= \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1\,m}+\sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1\,m}\\ \pm\sin\theta e^{\pm i\varphi}Y_{lm} &= -\sqrt{\frac{(l\pm m+1)(l\pm m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}Y_{l+1\,m\pm1}+\sqrt{\frac{(l\mp m)(l\mp m-1)}{(2l-1)(2l+1)}}Y_{l-1\,m\pm1}\end{aligned}\right\}\tag{5.2.26}$$

(5. 2. 24)をもちいれば

$$\frac{\partial}{\partial\theta}Y_{lm}=\frac{1}{2}\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,Y_{l\,m+1}e^{-i\varphi}-\frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,Y_{l\,m-1}e^{i\varphi}$$

$$m\cot\theta Y_{lm}=-\frac{1}{2}\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,Y_{l\,m+1}e^{-i\varphi}-\frac{1}{2}\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,Y_{l\,m-1}e^{i\varphi}$$

これらの式の両辺が同じパリティをもつことを確かめておくとよい.

球関数の正規直交性は(5. 2. 23)に示した. (4. 3. 8)に当る完全性は

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}Y_{lm}(\theta,\varphi)\,Y_{lm}^*(\theta',\varphi')=\delta(\cos\theta-\cos\theta')\,\delta(\varphi-\varphi').$$

右辺が $\cos\theta$ の δ 関数になるのは Y_{lm} が $d\cos\theta d\varphi$ で規格化されているためだが(両辺に $Y_{lm}^*(\theta,\varphi)$ を掛けて積分してみよ), $\sum_{l,m}\langle\cos\theta,\varphi|l,m\rangle\langle l,m|\cos\theta',\varphi'\rangle=\langle\cos\theta,\varphi|\cos\theta',\varphi'\rangle$ の記法にも正しく照応している.

上の完全性の式で l についての和をとらずにおけば, 加法定理

$$\sum_{m=-l}^{l}Y_{lm}(\theta,\varphi)\,Y_{lm}^*(\theta',\varphi')=\frac{2l+1}{4\pi}P_l(\cos\omega)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}Y_{l0}(\omega,0)\tag{5.2.27}$$

となる. ここに ω は (θ',φ') 方向と (θ,φ) 方向のなす角である(図5. 7). この式を証明しよう. まず, (θ',φ') 方向を z' 軸としたとき左辺がその方向の角運動量成分

$$L_{z'}=\boldsymbol{n}'\cdot\boldsymbol{L},\qquad \boldsymbol{n}'=(\sin\theta'\cos\varphi',\sin\theta'\sin\varphi',\cos\theta')$$

の固有値 0 の固有関数になることを(5. 2. 24), (5. 2. 26)によって示すと(5. 2. 27)の両辺が定数倍を除いて一致することがいえるから, つぎに $\theta=\varphi=0$ にとり

$$Y_{lm}(0,0)=\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\delta_{m,0}$$

に注意して両辺の値をくらべる.

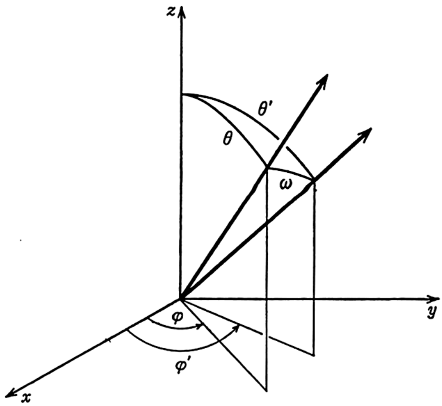


図5.7　2つのベクトルの間の角 ω

なお，上の完全性の式を φ' について0から 2π まで積分すれば，Legendre関数系の完全性

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)P_l(\cos\theta') = 2\delta(\cos\theta-\cos\theta') \qquad (5.2.28)$$

も得られる．ここでパズルを1つ：この式で $\theta'=0$ にとり，両辺に $P_{l'}(\cos\theta)$ を掛けて $\sin\theta d\theta$ で0から π まで積分してみよ．$\delta(\cos\theta-1)$ が $\cos\theta-1=0$ を中心としてその正負の側にまたがる急峰とすれば，それをいまの積分領域は半分しか覆わないが(図5.8)，さて…？

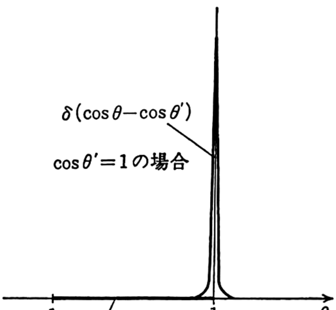


図5.8　$\cos\theta'=1, -1$ の場合，(5.2.28)の右辺の因子は4にしなければならない．

最後に，これも広くつかわれる公式

$$\sum_{l=0}^{\infty}s^l P_l(\cos\theta) = (1-2s\cos\theta+s^2)^{-1/2} \qquad (|s|<1) \qquad (5.2.29)$$

をあげておく．右辺は，s のベキ級数に展開すると s^l の係数として $P_l(\cos\theta)$ を与えるので，Legendre多項式の母関数とよばれる．証明は(5.2.20)をもちいてもできるが，いまは，上の結果を利用するために

$$\Phi(r,\theta) = \Theta(r-a)\sum_{l=0}^{\infty}\frac{a^l}{r^{l+1}}P_l(\cos\theta)+\Theta(a-r)\sum_{l=0}^{\infty}\frac{r^l}{a^{l+1}}P_l(\cos\theta) \qquad (5.2.30)$$

を考える．ここに $a>0$ で，Θ は，ふつうは小文字の θ で書くが，

$$\Theta(x)=\begin{cases}1 & x>0\\ 0 & x<0\end{cases}$$

という階段関数．これを微分すると

$$(\partial/\partial r)\Theta(r-a)=-(\partial/\partial a)\Theta(r-a)=\delta(r-a)$$

となることに注意し，(5.2.28) も利用して

$$\Delta\Phi(r,\theta)=-4r^{-2}\delta(r-a)\delta(\cos\theta-1)$$

を得る．(5.2.28) の右辺の係数 2 は，そこのパズルを解いた人は知っているとおり，$\theta'=0$ のとき 4 になるのである．いま計算した $\Delta\Phi$ の右辺は，勝手な連続関数 $F(r,\cos\theta,\varphi)$ を掛けて積分してみればわかるように 3 次元の δ 関数に等しい：

$$\Delta\Phi(r,\theta)=-4\pi\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}).$$

ただし，$\boldsymbol{a}$ は極軸の方向にある長さ a のベクトルである．(5.2.30) の Φ は，つまり，点 $\boldsymbol{a}$ に単位の正電荷がある場合の静電ポテンシャルの方程式を満たす．その上 $r\to\infty$ で 0 という境界条件も満たすから，Φ はその Coulomb ポテンシャルに一致することがわかる．すなわち，$\Phi=1/|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}|$．ここで $a<r$ として $s=a/r$ とおけば (5.2.29) が得られる．

読者は (5.2.29) に (5.2.22) の演算をほどこして $P_l^m(\cos\theta)$ の母関数をつくれ．

球関数の例をあげよう．

$$Y_{00}=\sqrt{\frac{1}{4\pi}};$$

$$Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \qquad Y_{1,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi};$$

$$Y_{20}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1) \qquad Y_{2,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2,\pm2}=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm2i\varphi}.$$

とくに，$m=\pm l$ のものは一般式も簡単である．

$$Y_{l,\pm l}=(-1)^{(l\pm l)/2}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(2l)!}{2^{2l}(l!)^2}}\sin^l\theta e^{\pm il\varphi}. \qquad (5.2.31)$$

また，$l\gg|m|$ のときには，漸近的に

$$Y_{lm} \cong (-1)^{(m-|m|)/2} \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{1}{\sin\theta}} \cos\left[\left(l+\frac{1}{2}\right)\theta + \frac{|m|\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right] e^{im\varphi}. \quad (5.2.32)$$

これらの関数形を見ると，l と m の物理的意味に見合った次のような特徴があることに気づく(図 5.9 参照).

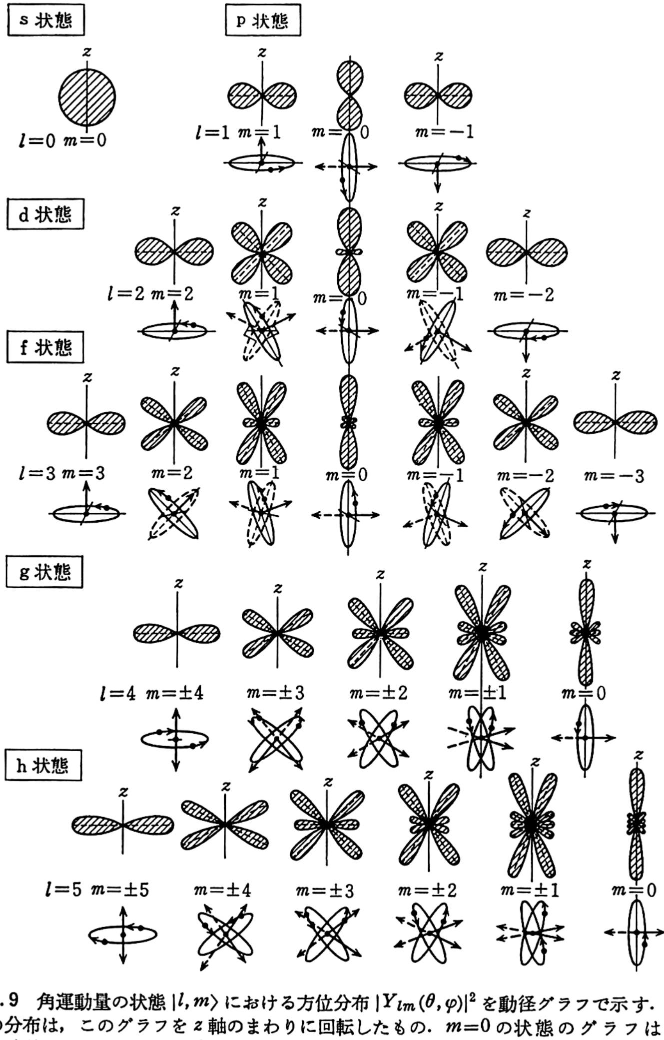


図 5.9 角運動量の状態 $|l, m\rangle$ における方位分布 $|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2$ を動径グラフで示す．実際の分布は，このグラフを z 軸のまわりに回転したもの．$m=0$ の状態のグラフは大体 $l+1$ 倍に拡大すると同じ l の他の状態のものと同じスケールになる．対応する古典的軌道も書きそえた(White, H. E.: *Phys. Rev.* 37, 1416 (1931) より).

仮に電子が角運動量 l, m の状態にあるものとして説明しよう．$m=\pm l$ の状態では“角運動量ベクトルは z 軸の方向にあり”，古典力学でなら電子は赤道面上を運動するところである．それに見合って，方向に関する電子の存在確率密度 $|Y_{l,\pm l}(\theta,\varphi)|^2$ は $\theta=\pi/2$ で最も大きく，赤道面から離れるにつれて小さくなって $\theta=0$ で 0 になる．存在確率密度の赤道面への集中は，(5.2.31) からわかるとおり，l が大きいほど強く，古典的極限 $l\to\infty$ で完全になる．これは，いま考えている状態 $|l,\ m=\pm l\rangle$ では

$$[({L_x}^2+{L_y}^2)\text{ の固有値}]/[L^2\text{ の固有値}] = 1/l$$

となることからも予期されていた(図 5.3)．電子の存在確率密度に即していうには，$\cos^2\theta$ の期待値を計算してみるのがよかろう．それは (5.2.26) をつかえば得られ

$$\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \cos^2\theta |Y_{l,\pm l}(\theta,\varphi)|^2 = \frac{1}{2l+3}.$$

反対に角運動量の z 成分が小さいという場合には，電子の“軌道はほとんど南北両極をとおり”，したがって電子の存在確率密度も極方向で高くなるはずだろう．$|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2$ を見ると，たしかにそうなっている．とくに，古典的極限では，(5.2.32) から

$$|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 \sim \frac{1}{2\pi^2}\frac{1}{\sin\theta} \qquad (l\gg|m|) \qquad (5.2.33)$$

となり，これは両極での軌道のこみぐあいから計算される確率密度に一致している(図 5.10)．ただし，(5.2.32) では激しく振動する $\cos^2[(l+1/2)\theta+\cdots]$ を θ の場所場所で局所的に平均して 1/2 でおきかえた．その激しい振動は，角運動量を

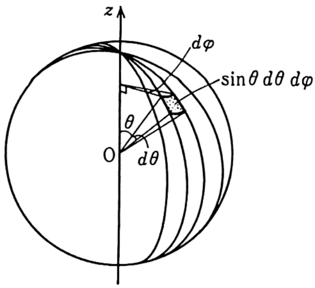


図 5.10 極をとおる大円に沿って電子が等速運動をすれば，θ の変域 $[0,\pi)$ のなかで $d\theta$ をはる弧の上に滞在する割合は $d\theta/\pi$．そして軌道面が $d\varphi$ のなかに落ちる割合は $d\varphi/2\pi$．この積を $d\theta, d\varphi$ がはる立体角で割ると，方向に関する電子の存在確率密度 $1/(2\pi^2\sin\theta)$ を得る．

大きくするために運動量が大きくなっていることを表す．この振動を半径rの大円上で見れば波長は$2\pi r/(l+1/2)$．これを de Broglie 波長とみて運動量に直すと$(l+1/2)\hbar/r\cong\sqrt{l(l+1)}\,\hbar/r$で，たしかに角運動量の大きさにあっている．

c) スピン

(*5. 2. 13*)は角運動量の大きさjが半奇数となる可能性も示しているのに，軌道角運動量の大きさは整数値(*5. 2. 19*)しかとらない．自然は，しかし，半奇数の角運動量という可能性も忘れずに利用していた．たとえば電子は軌道角運動量のほかに固有の角運動量をもち，その大きさは1/2である．一般に，粒子のもつ固有の角運動量を**スピン**とよぶ．スピンは半奇数とは限らない．π中間子のスピンは0，窒素の原子核のスピンは1である†．

スピン角運動量の演算子は軌道角運動量$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$のように正準変数で表すことができない．あるのは行列表示のみである．角運動量の一般公式(*5. 2. 14*)で$\langle j, m+1|$, $\langle j, m-1|$との内積をつくれば，これらは規格化されているので，複号同順として

$$\left.\begin{aligned}\langle j, m\pm1|J_x\pm iJ_y|j, m\rangle &= \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\\ \langle j, m|J_z|j, m\rangle &= m\hbar\end{aligned}\right\}\qquad(5.\,2.\,34)$$

これ以外の行列要素はどれも0である．

$\boldsymbol{J}$がスピン演算子のとき特に$\boldsymbol{S}$で表し，スピンの大きさをjの代わりにsで書こう．上の式から，$s=1/2$の場合

$$S_x\equiv\begin{bmatrix}\langle\frac{1}{2}|S_x|\frac{1}{2}\rangle & \langle\frac{1}{2}|S_x|-\frac{1}{2}\rangle\\ \langle-\frac{1}{2}|S_x|\frac{1}{2}\rangle & \langle-\frac{1}{2}|S_x|-\frac{1}{2}\rangle\end{bmatrix}=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix}$$

ただし，ブラ・ケットのなかに$s=1/2$を書くのは省いた．同様の記法で

$$S_y=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix},\qquad S_z=\frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}.$$

これらを

$$\boldsymbol{S}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}\qquad(5.\,2.\,35)$$

と書くと便利なことが多い．ここにσは**Pauli の行列**とよばれ，

$$\sigma_x{}^2=1,\qquad \sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x=0,\qquad \sigma_x\sigma_y=i\sigma_z\qquad(5.\,2.\,36)$$

† スピンの歴史については［朝永］を参照．

で x, y, z を循環的にかえた関係をすべて満たす.

上の行列 $\boldsymbol{S}$ はスピンの z 成分を対角化する表示であって，スピン状態 $|\chi\rangle$ の表示 $\langle m|\chi\rangle$ を

$$\begin{bmatrix} \langle \frac{1}{2}|\chi\rangle \\ \langle -\frac{1}{2}|\chi\rangle \end{bmatrix} \tag{5.2.37}$$

のように並べる約束で行列の行と列の順序をきめている．例として $\langle m|S_x|\chi\rangle$ を計算してみよ．$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ はそれぞれ S_z の固有ベクトルになっているが，これらを α, β で表す習慣がある.

スピンをもつ粒子に対しては，たとえば位置座標とスピンの z 成分をあわせて極大観測量になるから，状態の表示は詳しくいえば，$\langle \boldsymbol{r}, m|\psi\rangle$ のようになる．(5.2.37) の $\langle m|\chi\rangle$ も $\boldsymbol{r}$ の関数になるわけで，これを $m=1/2, -1/2$ に応じて $\psi_\uparrow(\boldsymbol{r}), \psi_\downarrow(\boldsymbol{r})$ と書けば(ψ up, ψ down と読む)

$$\begin{bmatrix} \langle \boldsymbol{r}, \ \ \frac{1}{2}|\psi\rangle \\ \langle \boldsymbol{r}, -\frac{1}{2}|\psi\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_\uparrow(\boldsymbol{r}) \\ \psi_\downarrow(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix}. \tag{5.2.38}$$

この状態では，粒子が位置 $\boldsymbol{r}$ の近傍の体積要素 $d^3\boldsymbol{r}$ にいてスピンが“上を向いている $(m=1/2)$”確率は $|\psi_\uparrow(\boldsymbol{r})|^2 d^3\boldsymbol{r}$，反対に“下を向いている $(m=-1/2)$”確率は $|\psi_\downarrow(\boldsymbol{r})|^2 d^3\boldsymbol{r}$ である．ただし‘2 成分’波動関数の規格化を

$$\int \{|\psi_\uparrow(\boldsymbol{r})|^2 + |\psi_\downarrow(\boldsymbol{r})|^2\} d^3\boldsymbol{r} = 1 \tag{5.2.39}$$

としている．スピンのたとえば x 成分の期待値 $\langle S_x\rangle$ は

$$\frac{\hbar}{2}\int (\psi_\uparrow^*(\boldsymbol{r}) \ \ \psi_\downarrow^*(\boldsymbol{r})) \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_\uparrow(\boldsymbol{r}) \\ \psi_\downarrow(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix} d^3\boldsymbol{r} = \hbar \int \mathrm{Re}\{\psi_\uparrow^*(\boldsymbol{r})\psi_\downarrow(\boldsymbol{r})\} d^3\boldsymbol{r} \tag{5.2.40}$$

となる.

一般に，極角 (θ, φ) をもつ単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ (図 5.11) の方向へのスピンの成分 S_n は，行列表示が

$$S_n = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{bmatrix} \tag{5.2.41}$$

となり，これも，物理から期待されるとおり，固有値 $\hbar/2$, $-\hbar/2$ の固有状態 $|\chi_{\pm n}\rangle$ をもつ:

$$\begin{bmatrix}\langle\frac{1}{2}|\chi_n\rangle\\ \langle-\frac{1}{2}|\chi_n\rangle\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}\langle\frac{1}{2}|\chi_{-n}\rangle\\ \langle-\frac{1}{2}|\chi_{-n}\rangle\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ \cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{bmatrix}. \tag{5.2.42}$$

角 φ を 0 から 2π まで変えて $\boldsymbol{n}$ を z 軸のまわりに 1 周させても，この固有関数はもとの値にもどらない．なお(5.2.42)は，(5.2.15)にならって S_z の固有ベクトル $\alpha=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$，$\beta=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$ に

$$U(\theta,\varphi)=e^{-iS_z\varphi/\hbar}e^{-iS_y\theta/\hbar} \tag{5.2.43}$$

を掛けても得られる．z 軸が図 5.5 の変換後の座標系で $\boldsymbol{n}$ の方向を向くようにするには，図 5.5 の Euler 角を $\beta=\theta$，$\alpha=\varphi$ にとればよいからである．(5.2.41)は

$$S_n=U(\theta,\varphi)S_zU^\dagger(\theta,\varphi) \tag{5.2.44}$$

と書ける．

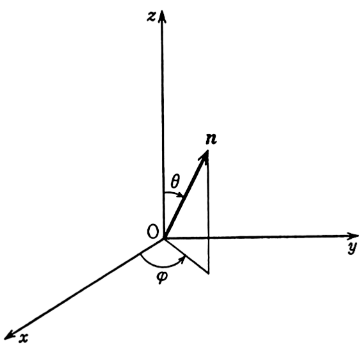


図 5.11　単位ベクトル $\boldsymbol{n}$

(5.2.43)を計算しよう．(5.2.36)の第 1 式から ${\sigma_y}^{2k}=1$，${\sigma_y}^{2k+1}=\sigma_y$，$k=0, 1, \cdots$ がでて

$$e^{-iS_y\theta/\hbar}=e^{-i\sigma_y\theta/2}\equiv\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-i\frac{\theta}{2}\right)^k{\sigma_y}^k=\cos\frac{\theta}{2}-i\sigma_y\sin\frac{\theta}{2} \tag{5.2.45}$$

となる．$e^{-iS_z\varphi/\hbar}$ の計算は S_z が対角形だから簡単である．行列の形に書けば

$$e^{-iS_y\theta/\hbar}=\begin{bmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2} & -\sin\dfrac{\theta}{2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2} & \cos\dfrac{\theta}{2}\end{bmatrix},\quad e^{-iS_z\varphi/\hbar}=\begin{bmatrix}e^{-i\varphi/2} & 0\\ 0 & e^{i\varphi/2}\end{bmatrix}$$

読者は，(5.2.43)の U をつくって，これが(5.2.42)を与えることを確かめよ．

これは，座標軸の回転の生成演算子になるという点で(5.2.35)の運動学的な角運動量らしさをみたことになる．こんどは，これが動力学的にも角運動量らし

い振舞いをすることを磁場 $\boldsymbol{B}$ のなかにおいた電子スピンの場合で例示しよう．

電子は電荷 $-e=-4.8\times10^{-10}$(e. s. u.)，質量 $m=9.1\times10^{-10}$(g) をもつが，そのスピン $\boldsymbol{S}$ の方向に

$$\boldsymbol{\mu}_S = g\cdot\frac{-e}{2mc}\boldsymbol{S} \qquad \left(\frac{e\hbar}{2mc} \equiv \beta = 5.8\times10^{-9}(\text{eV/gauss})\right) \qquad (5.2.46)$$

だけの磁気能率をになう ($g=2.002319114$)，これが磁場 $\boldsymbol{B}$ のなかで

$$H_S = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = g\frac{e}{2mc}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} = \frac{1}{2}g\beta\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B} \qquad (5.2.47)$$

のエネルギーをもつ．後に(5.6.5)が示すとおり，電子の軌道角運動量は磁気能率 $\boldsymbol{\mu}_L=(-e/2mc)\boldsymbol{L}$ をになう．これに比べて(5.2.46)は余分の因子 g をもつ．そのうち，主要部2は後に§7.6で見るとおり電子の Zitterbewegung の効果であり，残りは量子電磁力学的の効果としてほぼ完全に説明しつくされている．

さて，スピンの挙動を調べよう．Heisenberg 描像をとれば，運動方程式は

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{S} = \frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{S}, H_S] = g\frac{-e}{2mc}\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\mu}_S\times\boldsymbol{B} \qquad (5.2.48)$$

を与える．最右辺は確かに磁気能率に磁場がおよぼすモーメントである．この方程式の解は

$$\boldsymbol{S}(t) = e^{iH_St/\hbar}\boldsymbol{S}(0)e^{-iH_St/\hbar} \qquad (5.2.49)$$

特に B の方向に z 軸をとれば，$\omega_c\equiv eB/mc=1.76\times10^7\times B$(gauss) をもちいて $H_S=(g\omega_c/2)S_z$ となるから，$\boldsymbol{S}(0)\equiv\boldsymbol{S}$ として

$$\boldsymbol{S}(t) = e^{i(g\omega_c t/2)S_z/\hbar}\boldsymbol{S}e^{-i(g\omega_c t/2)S_z/\hbar}$$

(5.2.44)と比べて，これがスピンの図5.12のような歳差運動を意味していることがわかる．いま磁気能率 $\boldsymbol{\mu}_S$ は S と反対向きだから，これはモーメント $\boldsymbol{\mu}_S\times\boldsymbol{B}$ による古典力学的歳差運動と異ならない．

$$\text{歳差運動の周期} = \frac{2}{g}\frac{2\pi}{\omega_c} \qquad (5.2.50)$$

は，もし正確に $g=2$ だったら，一様な磁場 $\boldsymbol{B}$ における電子の円運動の周期に等しく，電子が円軌道を1周してくるとスピンの向きも元にもどることになる．このことを利用して $g-2$ が精密に測定される．$\omega_c(\text{s}^{-1})=1.76\times10^7\times B$(gauss) を電子の**サイクロトロン振動数**とよぶ．

もし定磁場 $\boldsymbol{B}$ に加えて，これに垂直な平面内で回転する磁場 $\boldsymbol{B}'(t)$ をかけると，

その回転周期が(*5.2.50*)に等しいとき共鳴がおこる．いわゆる**磁気共鳴**である．物質中では環境により電子の軌道運動との結合が問題になったり，内部磁場がきいてきたりで共鳴周波数が変るから，これを測定して逆に物質内部に関する情報を得ることができる．

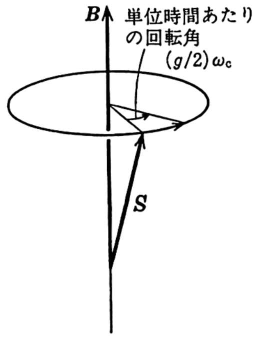


図5.12　磁場 $\boldsymbol{B}$ におかれた電子スピンの歳差運動．$(g/2)\omega_c = 1.76\times B$(gauss) の角速度をもつ．

d) 角運動量の合成

原子のなかを走る電子のハミルトニアンは**スピン-軌道相互作用**とよばれる項

$$H_{LS} = \frac{g}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} \qquad (5.2.51)$$

を含む．$\boldsymbol{L}$ は軌道角運動量，$\boldsymbol{S}$ はスピンであり，$V(r)$ は電子の感じる静電ポテンシャル $-e\phi(r)$ である．

一般に，電場 $\boldsymbol{E}$ に対して速度 $\boldsymbol{v}$ で動く座標系には，Lorentz 変換により磁場 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{E}\times(\boldsymbol{v}/c)$ が現れる ($v/c\ll 1$ としている)．電子は電場 $\boldsymbol{E}=-(\boldsymbol{r}/r)\,d\phi/dr$ に対し速度 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{p}/m$ で走るから磁場 $\boldsymbol{B}=-(mcr)^{-1}d\phi/dr\cdot\boldsymbol{L}$ を感じ，その結果スピンが(*5.2.47*)の示すエネルギー $-g(e/2m^2c^2)(r^{-1}d\phi/dr)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ をもつ——というと，(*5.2.51*)と因子 1/2 だけちがう．これは，電子が加速度をもつ周回運動をしているのに等速運動の Lorentz 変換をもちいたための誤りである．変換を正して因子 1/2 を説明した人の名をとって，これを Thomas 因子とよぶ．

スピン-軌道相互作用(*5.2.51*)における $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ の係数——$\xi(r)$ と書く——は正だから，$\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{S}$ は互いに相手を自分と反平行にしようとしてトルクをおよぼしあう．$\boldsymbol{S}$ からみれば $\boldsymbol{L}$ は(*5.2.47*)における磁場のようなものである．そのため，$\boldsymbol{S}$ と $\boldsymbol{L}$ は別々には保存しない：

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{S} = \frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{S}, H_{LS}] = \xi(r)[\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{S}]$$

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{L} = \frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{L}, H_{LS}] = -\xi(r)[\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{S}].$$

しかし，明らかに $\boldsymbol{J}\equiv\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$ は保存する：

$$[\boldsymbol{J}, H_{LS}] = 0. \tag{5.2.52}$$

同時に，$\boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{S}^2$ も保存するのである．たとえば

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{S}^2 = \xi(r)\{\boldsymbol{S}\cdot[\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{S}]+[\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{S}]\cdot\boldsymbol{S}\} = 0.$$

だから，スピンと軌道角運動量に関して $\boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{S}^2, \boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{J}_z$ を極大観測量に選ぶと，これらはハミルトニアンと対角化が両立し，良い量子数を与える．

そこで，これまで用いてきた L^2, L_z, S^2, S_z を対角化する基底 $|l\, m_l\, s\, m_s)$ から L^2, S^2, J^2, J_z を対角化する基底への変換関数 $(l\, m_l\, s\, m_s|l\, s\, j\, m\rangle$ を求めよう．ただし，紛らわしさを避けるため $|l\, m_l\, s\, m_s\rangle$ とすべきところを丸い括弧で書く．ブラ・ケットのなかで l, s を省略すると，問題は

$$|j\, m\rangle = \sum_{m_l=-l}^{l}\sum_{m_s=-s}^{l}|m_l\, m_s)(m_l\, m_s|j\, m\rangle \qquad (m=-j, \cdots, j) \tag{5.2.53}$$

のように書ける $|j\, m\rangle$ の全体を考えて，右辺の展開係数——**Clebsch-Gordan 係数**という——をきめることである．$|j\, m\rangle$ は規格化されているとしよう．

まず(5.2.53)の両辺に $J_z=L_z+S_z$ をかけて整理すると

$$\sum_{m_l=-l}^{l}\sum_{m_s=-s}^{l}(m_l+m_s-m)|m_l\, m_s)(m_l\, m_s|j\, m\rangle = 0.$$

$\{|m_l\, m_s)\}$ は1次独立のはずだから，

$$m = m_l+m_s \tag{5.2.54}$$

でないかぎり $(m_l\, m_s|j\, m\rangle=0$．つまり，$J_z$ は(5.2.54)以外の固有値をもたない．もっともなことだ(図5.13)．この結果から

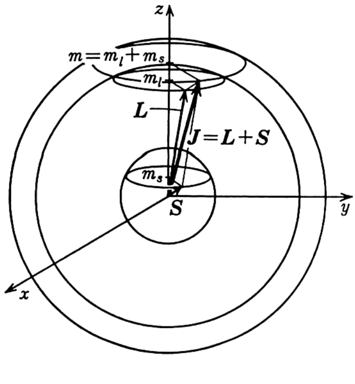


図5.13 角運動量の合成．角運動量の x, y 成分はゆらいでいるから，L^2, S^2, J^2, J_z を一定にすると L_z, S_z がゆらぐ．しかし，$L_z+S_z=J_z$ は一定．

$$-(l+s) \leqq m \leqq l+s \tag{5.2.55}$$

が知れる．

m が最大値 $l+s$ になるのは，(5.2.53) の右辺でいうと，(5.2.54) からみて m_l と m_s が最大値 l, s をとる $|l, s)$ にかぎる（図 5.14）．右辺でいえば $j \geqq l+s$ でなければならない．しかし $j > l+s$ だと (5.2.55) の上限を越える m があることになるので $j=l+s$．これが (5.2.53) に現れる j の最大値である：

$$j_{\max} = l+s.$$

そして，このとき (5.2.53) は

$$|l+s\ l+s\rangle = |l\ s)\ (l\ s|l+s\ l+s\rangle$$

となる．この左辺は規格化されているから，右辺の Clebsch-Gordan 係数の絶対値は 1．固有ベクトルは，位相までは定まらないのが本来だから

$$(l\ s|j_{\max}\ j_{\max}\rangle = 1 \tag{5.2.56}$$

と約束することにしよう．$|j_{\max}\ j_{\max}\rangle$ なるベクトルが (5.2.53) に含まれることが知れたので

$$\{|j_{\max}\ m\rangle\}_{m=-j_{\max},\,-j_{\max}+1,\,\cdots,\,j_{\max}} \tag{5.2.57}$$

という $(2j_{\max}+1)$ 本のベクトルが (5.2.53) に含まれていることもわかる．

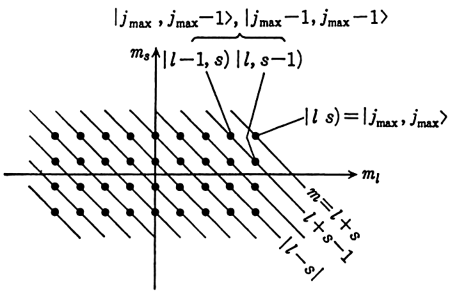


図 5.14　大きさ l, s の 2 つの角運動量の合成により，どんな合成角運動量ができるか．黒丸は合成前の状態 $|m_l\ m_s\rangle$ を表す．

つぎに，$m=l+s-1$ の場合．(5.2.53) の右辺は $|l\ s-1)$ と $|l-1\ s)$ という 2 本の線形結合になる（図 5.14）．それが張る 2 次元空間のうち 1 次元は (5.2.57) の $|j_{\max}\ j_{\max}-1\rangle$ に使われ，残りの 1 次元は上と同様の議論から $|j_{\max}-1\ j_{\max}-1\rangle$ になるべきことがわかる．これが (5.2.53) に含まれる以上

$$\{|j_{\max}-1, m\rangle\}_{m=-(j_{\max}-1),\,-(j_{\max}-1)+1,\,\cdots,\,(j_{\max}-1)} \tag{5.2.58}$$

の $2(j_{\max}-1)+1$ 本も含まれている．

同様の議論が順次に $m=l+s-2\,\mathrm{Min}(l,s)=|l-s|$ まで続けられる．(5. 2. 57)，(5. 2. 58)，… といった $\{|j,m\rangle\}_{m=j,\cdots,-j}$ の組が j の

$$|l-s|\leqq j\leqq l+s \tag{5. 2. 59}$$

の範囲の値に1つずつできることになるのである．新しい基底 $|j,m\rangle$ の総数は

$$\sum_{j=|l-s|}^{l+s}(2j+1)=(2l+1)(2s+1)$$

となり，確かに(5. 2. 53)の右辺をつくる基底 $\{|m_l\,m_s\rangle\}_{-l\leqq m_l\leqq l,-s\leqq m_s\leqq s}$ の総数に等しい．

以上の議論の結論は，大きさ l,s の2つの角運動量を合成すると，合成角運動量の大きさ j の状態 $\{|j\,m\rangle\}_{m=-j,\cdots,j}$ が $j=|l-s|,|l-s|+1,\cdots,l+s$ に対して1回ずつ現れる，と要約される．これが(5. 2. 53)に現れる j の値である．物理的にもうなずける結論ではないか(図5. 15)．

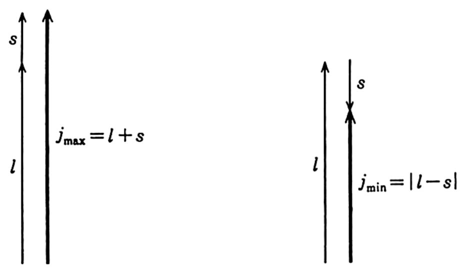


図5. 15 合成角運動量の最大，最小．こういうときにも本当は x,y 成分がゆらいでいる．

さて，(5. 2. 53)の Clebsch-Gordan 係数を定めなければならない．

まず $(m_l\,m_s|j\,j\rangle$ の形のものを決めよう．ただし(5. 2. 54)より $m_l+m_s=j$. 今後この種の条件は常に成り立っているものとして，断わらないこともある．行列要素 $(m_l\,m_s|J_+|j\,m\rangle$ を2通りに計算しよう．第1に J_+ をケットにかける．第2に $J_+=L_++S_+$ としてブラの側にかける．一般公式(5. 2. 14)と(4. 2. 6)により

$$\begin{aligned}&A(j,m+1)(m_l\,m_s|j\,m+1\rangle\\&\quad=A(l,m_l)(m_l-1\,m_s|j\,m\rangle+A(s,m_s)(m_l\,m_s-1|j\,m\rangle\end{aligned} \tag{5. 2. 60}$$

という漸化式が得られる．ただし

$$A(j,m)\equiv\sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

を定義した．これは $A(j,-m+1)$ に等しい．

漸化式(5. 2. 60)で $m=j$ とおけば左辺は0となるから

$$(m_l-1\, m_s|j\, j\rangle = -\sqrt{\frac{(s+j-m_l+1)(s-j+m_l)}{(l+m_l)(l-m_l+1)}}\langle m_l\, m_s-1|j\, j\rangle \tag{5.2.61}$$

この式で m_l を l から始めて順次さげてゆけば

$$(m_l\, m_s|j\, j\rangle = (-1)^{l-m_l}\sqrt{\frac{(j+s-m_l)\,!\,(l+s-j)\,!\,(l+m_l)\,!}{(2l)\,!\,(j-l+s)\,!\,(s-j+m_l)\,!\,(l-m_l)\,!}}(l\, j-l|j\, j\rangle \tag{5.2.62}$$

左辺の m_s は $j-m_l$ である．右辺の $(l\, j-l|j\, j\rangle$ は $|j\, j\rangle$ の規格化条件

$$\sum_{m_l=-l}^{l}|(m_l\, j-m_l|j\, j\rangle|^2 = 1$$

から絶対値がきまる．すぐ後で説明するように，(5.2.59) のすべての j に対し

$$(l\, j-l|j\, j\rangle > 0 \tag{5.2.63}$$

にできるので

$$(l\, j-l|j\, j\rangle = \sqrt{\frac{(2l)\,!\,(2j+1)\,!}{(l+s+j+1)\,!\,(l-s+j)\,!}} \tag{5.2.64}$$

これを (5.2.61) に代入すると $(m_l\, m_s|j\, j\rangle$ が得られる．

この結果から $(m_l\, m_s|j\, m\rangle$ がだせれば Clebsch-Gordan 係数がすべて求まったことになる．そのためには，$(m_l\, m_s|J_-|j\, m\rangle$ を (5.2.60) のときと同じく 2 通りに計算して得られる漸化式

$$\begin{aligned}&A(j, m)(m_l\, m_s|j\, m-1\rangle\\ &\quad = A(l, m_l+1)(m_l+1\, m_s|j\, m\rangle + A(s, m_s+1)(m_l\, m_s+1|j\, m\rangle\end{aligned} \tag{5.2.65}$$

を用いればよい．

さて，(5.2.63) が次の 2 つの約束から導かれることを証明しよう．

1°　約束　　$(l\, s|l+s\, l+s\rangle = 1$

2°　約束　　$\langle j-1\ -(j-1)|L_+|j\ -j\rangle \geqq 0, \qquad |l-s| \leqq j \leqq l+s.$

実は，1° の約束はすでに (5.2.56) でしている．2° は異なる j の $|j, -j\rangle$ の相対的な位相を決めるものである．前に (5.2.14) で j が同じで m の異なる $|jm\rangle$ の間の位相を約束しているから，1° と 2° をあわせて $\{|jm\rangle\}_{-j\leq m\leq j,\, |l-s|\leq j\leq l+s}$ の位相が完全にきまる．その結果が (5.2.63) を満たすことを証明したいのである．それには次のような手続きをふめばよい．

3°　　$\langle j'\,m'|L_z|j\,m\rangle \neq 0 \quad\Longrightarrow\quad m'=m$

証明. $[J_z, L_z]=0$ の行列要素 $\langle j'm'|\cdots|j\,m\rangle$ をとる.

4°　　$\langle j'\,m'|L_\pm|j\,m\rangle \neq 0 \quad\Longrightarrow\quad m'=m\pm1$ 　(複号同順)

証明. $[J_z, L_\pm]=\pm\hbar L_\pm$ の行列要素をとる.

5°　　$\langle j'm'|L_z|j\,m\rangle \neq 0 \quad\Longrightarrow\quad |j'-j|\leqq 1$

証明. $[J_+, L_+]=0$ の $\langle j'\,m'|\cdots|j\,m\rangle$ 要素をつくると

$$\langle j'\,m'|J_+|j'\,m'-1\rangle\langle j'\,m'-1|L_+|j\,m\rangle -\langle j'\,m'|L_+|j\,m+1\rangle\langle j\,m+1|J_+|j\,m\rangle=0 \tag{5.2.66}$$

いま $j'>j+1$ とすると，$m'>j+1$ にとれるから，4° より

$$\langle j'\,m'|L_+|j\,m+1\rangle=0,\qquad m'>j+1$$

が任意の m に対していえる．よって，上の等式から

$$\langle j'\,m'-1|L_+|j\,m\rangle=0,\qquad m'>j+1$$

これを上の等式で m' を $m'-1$ とした式に代入すれば，m' をさらに下げることができる．これをくりかえして，

$$\langle j'm'|L_+|jm\rangle=0,\qquad j'>j+1;\ m', m \text{ は任意}.$$

つぎに $[J_-, L_-]=0$ から

$$\langle j'm'|J_-|j'\,m'+1\rangle\langle j'\,m'+1|L_+|jm\rangle-\langle j'm'|L_-|j\,m-1\rangle\langle j\,m-1|J_-|jm\rangle=0$$

をだす．上と同じく $j'>j+1$ とし，こんどは $m'<-j+1$ からはじめて m' を上げてゆくことにより

$$\langle j'm'|L_-|jm\rangle=0,\qquad j'>j+1;\ m', m \text{ は任意}.$$

L_+, L_- に対する結果から L_x, L_y について同じ結論が得られ，これらは自己共役だから転置行列を考えれば $j'<j-1$ の場合に移ることができる．これで 5° が証明された．

6°　　ph $\langle j'm'|L_+|jm\rangle$ は m', m によらない．L_z についても同じ．

ただし，複素数 $Z=|Z|e^{i\varphi}$ に対し $e^{i\varphi}$ を ph Z と記す．この型の命題では，とくに断わらなくても，$Z=0$ の場合を除く約束にしよう．

証明. L_+ のほうでいえば，(5.2.66) と (5.2.14) の位相の約束から明らか．

問題の $\langle j'm'|L_+|jm\rangle$ は 4° により $m'=m+1$ のとき以外は 0 だから．

7°　　ph $\langle j\ -j|L_z|j+1\ -j\rangle=$ ph $\langle j\ -j|L_+|j+1\ -j-1\rangle$

証明. $[J_+, L_z]=-\hbar L_+$ の $\langle j\,m+1|\cdots|j+1\,m\rangle$ 要素をつくると

$$\langle j\,m+1|J_+|j\,m\rangle\langle j\,m|L_z|j+1\,m\rangle-\langle j\,m+1|L_z|j+1\,m+1\rangle\langle j+1\,m+1|J_+|j\,m\rangle$$
$$= -\hbar\langle j\,m+1|L_+|j+1\,m\rangle. \tag{5.2.67}$$

$m=-j-1$ とおけば左辺の第1項が消える．約束(5.2.14)を思いだせば証了．

8° $$\left.\begin{array}{l}\langle j'\,m'|L_z|j\,m\rangle \geqq 0\\ \langle j'\,m'|S_z|j\,m\rangle \leqq 0\end{array}\right\}\quad (j'\neq j;\ m', m \text{ は任意}).$$

証明．2° の約束を命題7° によりいいかえ，6° を用いる．

9° $$\mathrm{ph}\,(m_l\,m_s|j\,j\rangle = (-1)^{l-m_l}\mathrm{ph}\,(l\,j-l|j\,j\rangle$$

証明．漸化式(5.2.60)で $m=j$ とおけば左辺が0となり

$$\mathrm{ph}\,(m_l-1\,m_s|j\,j\rangle = -\mathrm{ph}\,(m_l\,m_s-1|j\,j\rangle$$

が得られる．

10° $$(l\,j-l|j\,j\rangle > 0$$

これが証明したかった(5.2.63)である．

証明．$[J_+, L_z]=-\hbar L_+$ の $\langle j+1\,j+1|\cdots|j\,j\rangle$ 要素が

$$\langle j+1\,j+1|J_+|j+1\,j\rangle\langle j+1\,j|L_z|j\,j\rangle = -\hbar\langle j+1\,j+1|L_+|j\,j\rangle$$

を与える．左辺は(5.2.14)の位相の約束と8° により $\leqq 0$ であるから，可能なすべての j の値に対して

$$\sum_{m_l}\langle j+1\,j+1|m_l\,j-m_l+1)(m_l|L_+|m_l-1)(m_l-1\,j-m_l+1|j\,j\rangle \geqq 0$$

これを9° により書き直せば

$$\begin{aligned}&\mathrm{ph}\,\langle j+1\,j+1|l\,j+1-l)\,\mathrm{ph}\,(l\,j-l|j\,j\rangle\\ &\quad\cdot\sum_{m_l}(-1)^{l-m_l}(-1)^{l-m_l+1}|\langle j+1\,j+1|m_l\,j-m_l+1\rangle\\ &\quad\cdot\langle m_l-1\,j-m_l+1|j\,j\rangle|(m_l|L_+|m_l-1) \geqq 0\end{aligned}$$

ところが(5.2.14)の位相の約束により $(m_l|L_+|m_l-1)<0$ なので

$$\mathrm{ph}\,\langle j+1\,j+1|l\,j+1-l)\,\mathrm{ph}\,(l\,j-l|j\,j\rangle > 0$$

となる．1° の約束により第2因子は1だから

$$\mathrm{ph}\,\langle j+1\,j+1|l\,j+1-l) > 0, \qquad |l-s| \leqq j+1 \leqq l+s$$

が得られて，証明おわり．

簡単な場合の Clebsch-Gordan 係数を表にして示そう．丸い括弧は角括弧にもどし，これまでの l, s の代わりに j_1, j_2 の記号をもちいる．

表 5.1 $\langle j_1 m_1 \frac{1}{2} m_2 | j_1 \frac{1}{2} j\, m\rangle$

j \ m_2	1/2	−1/2
$j_1+\dfrac{1}{2}$	$\sqrt{\dfrac{j_1+m+1/2}{2j_1+1}}$	$\sqrt{\dfrac{j_1-m+1/2}{2j_1+1}}$
$j_1-\dfrac{1}{2}$	$-\sqrt{\dfrac{j_1-m+1/2}{2j_1+1}}$	$\sqrt{\dfrac{j_1+m+1/2}{2j_1+1}}$

表 5.2 $\langle j_1 m_1 1\, m_2 | j_1 1\, j\, m\rangle$

j \ m_2	1	0	−1
j_1+1	$\sqrt{\dfrac{(j_1+m)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}}$	$\sqrt{\dfrac{(j_1-m+1)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(j_1+1)}}$	$\sqrt{\dfrac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}}$
j_1	$-\sqrt{\dfrac{(j_1+m)(j_1-m+1)}{2j_1(j_1+1)}}$	$\dfrac{m}{\sqrt{j_1(j_1+1)}}$	$\sqrt{\dfrac{(j_1-m)(j_1+m+1)}{2j_1(j_1+1)}}$
j_1-1	$\sqrt{\dfrac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{2j_1(2j_1+1)}}$	$-\sqrt{\dfrac{(j_1-m)(j_1+m)}{j_1(2j_1+1)}}$	$\sqrt{\dfrac{(j_1+m+1)(j_1+m)}{2j_1(2j_1+1)}}$

たとえば，表 5.1 で $j_1=j_2=1/2$ の場合，$j=1$, $m=0$ の状態が

$$|1\,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\left[|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\rangle+|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle\right] \tag{5.2.68}$$

と求められ，$j=0$, $m=0$ の状態は

$$|0\,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}\left[-|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\rangle+|\tfrac{1}{2}\ \tfrac{1}{2}\rangle|\tfrac{1}{2}\ -\tfrac{1}{2}\rangle\right] \tag{5.2.69}$$

となることがわかる．この右辺では $|j_1m_1j_2m_2\rangle$ を $|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$ と書いている．左辺では $|j_1j_2j\,m\rangle$ とすべきところを $|j\,m\rangle$ としている．$j=1$, $m=\pm1$ の状態はどうなるか．

Clebsch-Gordan 係数について，種々の対称性が知られている．まず，上の命題8° に現れた $\boldsymbol{L}, \boldsymbol{S}$ の非対称が，命題5° により

$$\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j\,m\rangle = (-1)^{j_1+j_2-j}\langle j_2m_2j_1m_1|j_2j_1j\,m\rangle \tag{5.2.70}$$

をもたらす．次の節の時間反転の議論からは

$$\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j_3m_3\rangle = (-1)^{j_2+m_2}\sqrt{\frac{2j_3+1}{2j_1+1}}\langle j_2\ -m_2\ j_3\,m_3|j_2j_3j_1m_1\rangle \tag{5.2.71}$$

が証明される．これを (5.2.70) と組み合わせれば，たとえば

表 5.3 $\langle j_1 m_1 \tfrac{3}{2} m_2 | j_1 \tfrac{3}{2} j m \rangle$

$j \backslash m_2$	3/2	1/2
$j_1+\frac{3}{2}$	$\sqrt{\frac{(j_1+m-1/2)(j_1+m+1/2)(j_1+m+3/2)}{(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_1+3)}}$	$\sqrt{\frac{3(j_1+m+1/2)(j_1+m+3/2)(j_1-m+3/2)}{(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_1+3)}}$
$j_1+\frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{3(j_1+m-1/2)(j_1+m+1/2)(j_1-m+3/2)}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+3)}}$	$-\left(j_1-3m+\frac{3}{2}\right)\sqrt{\frac{j_1+m+1/2}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+3)}}$
$j_1-\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{3(j_1+m-1/2)(j_1-m+1/2)(j_1-m+3/2)}{(2j_1-1)(2j_1+1)(2j_1+2)}}$	$-\left(j_1+3m-\frac{1}{2}\right)\sqrt{\frac{j_1-m+1/2}{(2j_1-1)(2j_1+1)(2j_1+2)}}$
$j_1-\frac{3}{2}$	$-\sqrt{\frac{(j_1-m-1/2)(j_1-m+1/2)(j_1-m+3/2)}{2j_1(2j_1-1)(2j_1+1)}}$	$\sqrt{\frac{3(j_1+m-1/2)(j_1-m-1/2)(j_1-m+1/2)}{2j_1(2j_1-1)(2j_1+1)}}$
$j \backslash m_2$	$-1/2$	$-3/2$
$j_1+\frac{3}{2}$	$\sqrt{\frac{3(j_1+m+3/2)(j_1-m+1/2)(j_1-m+3/2)}{(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_1+3)}}$	$\sqrt{\frac{(j_1-m-1/2)(j_1-m+1/2)(j_1-m+3/2)}{(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_1+3)}}$
$j_1+\frac{1}{2}$	$\left(j_1+3m+\frac{3}{2}\right)\sqrt{\frac{j_1-m+1/2}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+3)}}$	$\sqrt{\frac{3(j_1+m+3/2)(j_1-m-1/2)(j_1-m+1/2)}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+3)}}$
$j_1-\frac{1}{2}$	$-\left(j_1-3m-\frac{1}{2}\right)\sqrt{\frac{j_1+m+1/2}{(2j_1-1)(2j_1+1)(2j_1+2)}}$	$\sqrt{\frac{3(j_1+m+1/2)(j_1+m+3/2)(j_1-m-1/2)}{(2j_1-1)(2j_1+1)(2j_1+2)}}$
$j_1-\frac{3}{2}$	$-\sqrt{\frac{3(j_1+m-1/2)(j_1+m+1/2)(j_1-m-1/2)}{2j_1(2j_1-1)(2j_1+1)}}$	$\sqrt{\frac{(j_1+m-1/2)(j_1+m+1/2)(j_1+m+3/2)}{2j_1(2j_1-1)(2j_1+1)}}$

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle = (-1)^{j_1 - m_1} \sqrt{\frac{2j_3+1}{2j_2+1}} \langle j_3\, m_3\, j_1\, -m_1 | j_3 j_1 j_2 m_2 \rangle. \tag{5.2.72}$$

あるいは，(5.2.68) を3度くりかえしもちいて

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle = (-1)^{j_1+j_2-j_3} \langle j_1\, -m_1\, j_2\, -m_2 | j_1 j_2 j_3\, -m_3 \rangle. \tag{5.2.73}$$

上の表に与えた Clebsch-Gordan 係数が実際これらの対称性をもつことをチェックしてみるとよい．

§5.3 時間反転

与えられた法則Lについて，それを満たす1つの運動Mを立体映画にとって逆まわしに映写したとき見られる運動 M^R は法則Lを満たすであろうか？ この型の問題を，これから考える．M^R をMの**時間反転**という．もし，法則Lを満たす任意の運動Mの時間反転 M^R がまたLを満たすならば，この法則Lは時間反転に関して対称であるという．あるいは手短かに**時間反転不変**であるという．

a) 簡単な場合

量子力学の運動法則である Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\boldsymbol{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2} + V(\boldsymbol{r}) \right] \psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{5.3.1}$$

は時間反転不変であろうか？

まず，簡単な $V=0$ の場合を考える．たとえば，一定の運動量 $\boldsymbol{p}$，エネルギー $E=\boldsymbol{p}^2/(2\mu)$ の運動は波動関数

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \exp[i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)/\hbar] \tag{5.3.2}$$

で表されるが，その運動の時間反転は，上の定義から運動量 $-\boldsymbol{p}$，エネルギー E の運動となって，これを表す

$$\psi^R(\boldsymbol{r}, t) = \exp[i(-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)/\hbar] \tag{5.3.3}$$

は $V=0$ の Schrödinger 方程式 (5.3.1) を満たしている．同様のことが任意の解にまで拡張できるならば $V=0$ の Schrödinger 方程式は時間反転不変といえることになる．しかし，任意の解 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ に対して，その時間反転 $\psi^R(\boldsymbol{r}, t)$ とはなにか？ 上の古典力学的な定義では，この場合の答はだせない．

(5.3.2) と (5.3.3) を比べると

$$\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}, t) = \psi^*(\boldsymbol{r}, -t) \tag{5.3.4}$$

の関係がある．一般にこれが $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ の時間反転にふさわしい性質をもつことを説明しよう．

第1に，粒子の存在確率密度は

$$|\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}, t)|^2 = |\psi^*(\boldsymbol{r}, -t)|^2 \tag{5.3.5}$$

となり，もとの $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ が与える密度に比べると，$t=0$ では一致して，以後は時間を逆行するように動いてゆく．もし $|\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 = f(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}t)$ であったら $|\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}, t)|^2 = f(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{v}t)$ となるわけだから，確かに時間反転にふさわしい．

第2．ψ^{R} をもちいて運動量の期待値をつくってみると

$$\begin{aligned}
&\left\langle \psi^*(\boldsymbol{r}, -t), -i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\psi^*(\boldsymbol{r}, -t) \right\rangle \\
&= \int \psi(\boldsymbol{r}, -t)\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\psi^*(\boldsymbol{r}, -t)\right]d\boldsymbol{r} \\
&= -\left(\int \psi^*(\boldsymbol{r}, -t)\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r}, -t)\right]d\boldsymbol{r}\right)^*
\end{aligned}$$

期待値は実数だから

$$\begin{aligned}
&\langle \psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}, t), \boldsymbol{p}\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}, t) \rangle \\
&\quad = -\langle \psi(\boldsymbol{r}, -t), \boldsymbol{p}\psi(\boldsymbol{r}, -t) \rangle
\end{aligned} \tag{5.3.6}$$

すなわち，運動量の ψ^{R} による時刻 t の期待値 $\langle \boldsymbol{p} \rangle_t{}^{\mathrm{R}}$ は，もとの ψ による期待値 $\langle \boldsymbol{p} \rangle_t$ と

$$\langle \boldsymbol{p} \rangle_t{}^{\mathrm{R}} = -\langle \boldsymbol{p} \rangle_{-t} \tag{5.3.7}$$

の関係にある．これも確かに時間反転にふさわしい(図5.16)．同様の関係は角運動量についても成り立つ．一般に正準変数からつくられる任意の観測量について，(5.3.4) から時間反転にふさわしい期待値が得られるのである．

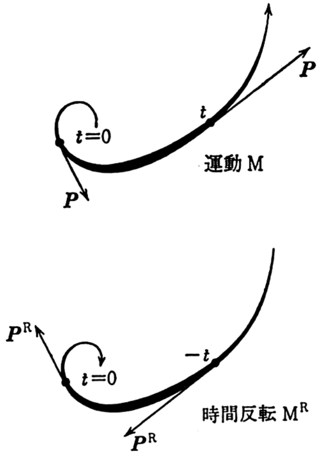


図5.16　時間反転．運動 M を映画にとって逆まわしに映写したとき見られる運動が M の時間反転 $\mathrm{M^R}$ である．

そこで，(5.3.4) の $\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)$ が量子力学における $\psi(\boldsymbol{r},t)$ の時間反転の表現であるとしてみよう．これは Schrödinger 方程式 (5.3.1) を満たすだろうか．満たす！　もちろん，もとの $\psi(\boldsymbol{r},t)$ が満たすとして，である．ここでは——(5.3.4) 以後ずっとだが——$V=0$ に限らなくてよい．$V(\boldsymbol{r})$ は，位置エネルギーとして当然そうであるように，実数値関数ならばなんでもよいのである．実際，$\psi(\boldsymbol{r},t)$ が (5.3.1) を満たすとして，その複素共役をとれば

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\boldsymbol{r},t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}^2}+V(\boldsymbol{r})\right]\psi^*(\boldsymbol{r},t).$$

ここで $t=-t'$ とおくと $-\partial/\partial t=\partial/\partial t'$ だから

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\psi^*(\boldsymbol{r},-t')=\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}^2}+V(\boldsymbol{r})\right]\psi^*(\boldsymbol{r},-t').$$

これは (5.3.4) の $\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)$ が望みどおり Schrödinger 方程式 (5.3.1) を満たすことを示している．この方程式は時間反転不変であった．

b) スピンのある場合

しかし，(5.3.4) は量子力学における時間反転の定義として十分に一般的であるとはいえない．それは，正準変数で書けないスピンという観測量もあつかわねばならないからである．

例として，考える粒子がスピン 1/2 をもっているとしよう．その波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)=\begin{bmatrix}\psi_\uparrow(\boldsymbol{r},t)\\ \psi_\downarrow(\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix}$ に対しては，時間反転を，(5.3.4) でなく

$$\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)=\sigma_y\psi^*(\boldsymbol{r},-t) \tag{5.3.8}$$

と定義しなければならない．こうすると，スピン $\boldsymbol{S}=(\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$ の期待値が時間反転にふさわしいものになる．実際，

$$\langle\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t),\boldsymbol{\sigma}\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)\rangle=\langle\psi^*(\boldsymbol{r},-t),\sigma_y\boldsymbol{\sigma}\sigma_y\psi^*(\boldsymbol{r},-t)\rangle$$

となるが，Pauli の行列に対して

$$\sigma_y\boldsymbol{\sigma}\sigma_y=-\bar{\boldsymbol{\sigma}}\qquad(\bar{\ }\text{は複素共役}) \tag{5.3.9}$$

が成り立つので

$$\langle\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t),\boldsymbol{\sigma}\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)\rangle=-\langle\psi(\boldsymbol{r},-t),\boldsymbol{\sigma}\psi(\boldsymbol{r},-t)\rangle^*.$$

期待値は実数だから，スピンの期待値について (5.3.7) に照応する関係

$$\langle\boldsymbol{S}\rangle_t{}^{\mathrm{R}}=-\langle\boldsymbol{S}\rangle_{-t} \tag{5.3.10}$$

が成り立つことになる．(5.3.8) に σ_y を入れなかったら，こうはならない．

新しい定義(5. 3. 8)を用いても，正準変数にかかわる以前の(5. 3. 5), (5. 3. 7)が成り立つことに変わりはない.

では，$\psi(\boldsymbol{r}, t)$ が Schrödinger 方程式を満たすとき，(5. 3. 8)の $\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}, t)$ も満たすだろうか？　こんどは粒子にスピンがあるから，(5. 3. 1)のハミルトニアンに(5. 2. 47)の H_S と(5. 2. 51)の H_{LS} を加えて

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2}+V(\boldsymbol{r})+g\frac{e}{2\mu c}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}+\xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\right]\psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{5. 3. 11}$$

を考えてみよう．まず，複素共役をとれば，$\boldsymbol{L}=-i\hbar\boldsymbol{r}\times\partial/\partial\boldsymbol{r}$ なので

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\boldsymbol{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2}+V(\boldsymbol{r})+g\frac{e}{2\mu c}\bar{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{B}-\xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\bar{\boldsymbol{S}}\right]\psi^*(\boldsymbol{r}, t)$$

となる．つぎに両辺に左から σ_y を掛け，(5. 3. 9)より $\sigma_y\bar{\boldsymbol{S}}=-\boldsymbol{S}\sigma_y$ となることに注意する．最後に t を $-t$ に変えると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2}+V(\boldsymbol{r})-g\frac{e}{2\mu c}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}+\xi(\boldsymbol{r})\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\right]\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}, t) \tag{5. 3. 12}$$

この結果は(5. 3. 11)に比べて磁場 $\boldsymbol{B}$ が $-\boldsymbol{B}$ に変わっている以外ちがわない.

実は ψ から時間反転(5. 3. 8)によって ψ^{R} にうつったとき，同時に $\boldsymbol{B}$ を

$$\boldsymbol{B}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}, t) = -\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}, -t) \tag{5. 3. 13}$$

に変えるべきだった．フィルムを逆まわしすると，磁場をつくっているはずの電流の向きも逆になるからである.

こうして，Schrödinger 方程式(5. 3. 11)は電磁気的な環境の時間反転まで含めれば時間反転不変である.

電場 $\boldsymbol{E}$ については

$$\boldsymbol{E}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}, t) = \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, -t) \tag{5. 3. 14}$$

とすべきだから，Schrödinger 方程式の時間反転不変を要請すれば，ハミルトニアンは $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{E}$ に比例する項は含むことができない．実際，電子の電気双極子モーメントを検出する実験は否定的な結果におわっている.

一般に，自然法則に対し時間反転不変は非常によい精度で成り立っている．読者は(5. 3. 13), (5. 3. 14)が電荷密度と電流に対する $\rho^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}, t)=\rho(\boldsymbol{r}, -t)$, $\boldsymbol{j}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}, t)$

$=-\boldsymbol{j}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},-t)$ とあわせて Maxwell 方程式を不変にすることを確かめよ．

時間反転の変換 (5.3.8) は，複素共役をとるという変換を K と記せば $\psi^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r},t)=\sigma_y K\psi(\boldsymbol{r},-t)$ と書ける．そこで，観測量 F の時間反転を

$$F^{\mathrm{R}}(\cdot\,;t)=K\sigma_y F(\cdot\,;-t)\sigma_y K \qquad (5.3.15)$$

によって定義しよう．F の ; の後に書いた t はあらわな t 依存性を表す．Schrödinger 方程式の時間反転不変性は，(5.3.15) の変換に関してハミルトニアンが不変なことと言いかえられる．

§5.4 中心力の場における運動

ポテンシャルが空間の定点 O からの距離 r のみの関数 $V=V(r)$ であるような，いわゆる中心力の場における，質量 μ の粒子の運動をしらべよう．定常状態を決める Schrödinger 方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta+V(r)\right]u(\boldsymbol{r})=Eu(\boldsymbol{r}). \qquad (5.4.1)$$

ポテンシャルの球対称性を利用するには，力の中心 O を原点とする極座標系 (r,θ,φ) をもちいるのがよい．軌道角運動量 $\boldsymbol{L}$ の 2 乗を極座標表示した (5.2.16) に注意すれば，(5.4.1) の左辺にあるハミルトニアンは，$r>0$ では

$$H=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{L^2}{2\mu r^2}+V(r) \qquad (5.4.2)$$

と書ける．これは L^2, L_z と可換だから，固有関数 u は，l, m で角運動量を指定し，ν で動径方向の運動状態を指定することにして（ν がどんなものかは追って明らかにする），

$$u_{\nu lm}(\boldsymbol{r})=R_{\nu l}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (5.4.3)$$

の形としてよい．この形にかぎってさがしても，固有関数の完全系が得られるからである．実際，(5.4.1) にあたる固有値方程式

$$Hu_{\nu lm}=E_{\nu l}u_{\nu lm}$$

は，(5.2.25) により動径関数 $R_{\nu l}$ にたいする微分方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}+V(r)\right]R_{\nu l}(r)=E_{\nu l}R_{\nu l}(r) \qquad (5.4.4)$$

に帰着され，この解の全体が r の関数の空間で完全系をなすことがいえるから，

θ, φ の空間における球関数系の完全性とあわせて，(5.4.3)の形をした固有関数が集まって完全系をなすことが証明される．この議論を精密にすることは第VI部にゆずり，ここでは微分方程式(5.4.3)の解を決めるための境界条件が，つぎの意味の規格化可能性を含むべきことだけ述べておく：

$$\int_0^\infty R_{\nu' l'}{}^*(r) R_{\nu l}(r) r^2 dr = \delta_{ll'}\delta_{\nu\nu'} \quad \text{または} \quad \delta_{ll'}\delta(\nu-\nu') \tag{5.4.5}$$

ここに，Kronecker のデルタ $\delta_{\nu\nu'}$ は量子数 ν, ν' の少なくとも一方が離散的な場合にもちい，デルタ関数は ν, ν' がともに連続パラメーターの場合にもちいる．

なお，(5.4.4)において $R_{\nu l}, E_{\nu l}$ が磁気量子数 m によらないのは，問題の球対称性 $[H, L_\pm]=0$ による．(5.4.4)における $\hbar^2 l(l+1)/2\mu r^2$ を遠心力のポテンシャルという．これを $V(r)$ に加えたものが動径方向の運動に対する有効ポテンシャルになるのは，古典力学と同様である．

これから(5.4.4)の解をしらべて，中心力の場における粒子の量子力学的運動の一般的特徴をみよう．議論を複雑にしないために，ポテンシャル $V(r)$ は，断片的連続であって，つぎの表の条件Iまたはそれより多少つよい条件IIを満たすものにかぎっておく．

表5.4　ポテンシャルに課す条件

	条件I	条件II
$r \longrightarrow \infty$ のとき	$r^{1+\delta}V(r) \longrightarrow 0$	$r^{2+\delta}V(r) \longrightarrow 0$
$r \longrightarrow 0$ のとき	$r^2 V(r) \longrightarrow 0$	

この表の δ は，たとえば条件Iの $r\to\infty$ に関する部分でいうと，与えられたポテンシャル $V(r)$ に対して適当な $\delta>0$ があって $r^{1+\delta}V(r)\to 0\,(r\to\infty$ のとき) と読む．この条件を満たす $V(r)$ を**短距離力**のポテンシャルという．Coulomb ポテンシャルは $1/r$ に比例するので，この条件を満たさない．この力は典型的な**長距離力**である．節をあらためて§5.5であつかう．物理で知られている短距離力は，どれも強いほうの条件IIを満たす．その典型は湯川ポテンシャル $\propto e^{-\varepsilon r}/r$ をもつ核力である．いま

$$\left.\begin{aligned} \frac{2\mu}{\hbar^2}E_{\nu l} \equiv \varepsilon, \qquad \frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r) \equiv U(r) \\ R_{\nu l}(r) = \chi(r)/r \end{aligned}\right\} \tag{5.4.6}$$

とおく．χ に添字 ν, l をつけるのは略した．(5.4.4)は

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\varepsilon-U(r)\right]\chi(r)=0 \tag{5.4.7}$$

となる．この χ をつかえば，粒子が動径方向の区間 $[r, r+dr]$ に見出される確率は $|\chi(r)|^2dr$ で与えられる．(5.4.7)は1次元運動に対するSchrödinger方程式と同じ形である．とくに $l=0$ の場合には遠心力ポテンシャルがないので，第2章であつかった諸例が，ほとんどそのまま，いまの問題にうつされる．3次元運動の動径関数には次の項に述べるような特別な境界条件が原点 $r=0$ にあることさえ気をつければよい．

(5.4.7)から導かれる重要な結論のひとつに

$$\varepsilon \geqq \min_r U(r) \tag{5.4.8}$$

がある．これを説明しよう．(5.4.7)から $\varepsilon-U(r)<0$ となる r の区間で $\chi(r)$ のグラフは r 軸に対して凸と知れる(図5.17)．したがって，ポテンシャル $U(r)$ が底をもつ場合には，$\varepsilon<\min_r U(r)$ なる ε に対して $\chi(r)$ は単調に増大または減少をつづけるほかなく，規格化可能の条件(5.4.5)を満たすことができない．エネルギーがポテンシャルの底より低い量子力学的状態はあり得ないのである．このかぎりでは古典力学の場合と異ならないが，量子力学ではエネルギー・スペクトル

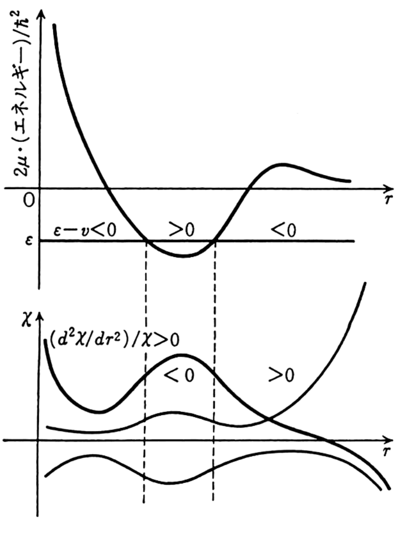


図5.17 (5.4.7)の解 $\chi(r)$ のグラフは，$\varepsilon-U(r)<0$ の範囲では r 軸に反撥され，$\varepsilon-U(r)>0$ の範囲では吸い寄せられる．

の下端がポテンシャルの底にとどかず，‘零点振動’が残る．

a) 原点における境界条件

原点 $r=0$ の近傍で $\chi(r)\sim r^{\lambda}$ として λ を決めてみよう．

まず $l\neq 0$ とする．原点の近傍では表5.4の条件のため(5.4.7)で遠心力ポテンシャルが卓越するので，$\lambda(\lambda-1)-l(l+1)=0$ から

$$\chi(r)\sim r^{l+1}\quad \text{または}\quad r^{-l}\qquad (r\downarrow 0).$$

$l=0$ のときも，$r\sim 0$ で $U(r)\sim \alpha r^{\beta-2}$ $(\beta>0)$ とすれば $\chi(r)\sim\sqrt{r}\,Z_{1/\beta}(2\alpha^{1/2}r^{\beta/2}/\beta)$ となるので結論は変わらない．ここに Z は円柱関数を表す．

$r=0$ が微分方程式(5.4.7)の確定特異点である場合には，r^{-l} のように振る舞うほうの解に $r^{l+1}\log r$ も含まれることがある．しかし，この項に重要性はない．

r^{-l} の解は $l\geqq 1$ では規格化可能の条件(5.4.5)を破るので採用できない．$l=0$ だとその問題はないが，この解は $R_{\nu,l}\sim 1/r$ にし，もともとの(5.4.1)に

$$\Delta\frac{1}{r}=-4\pi\delta(\boldsymbol{r})$$

によって δ 関数をもたらす．(原点に単位点電荷がある場合の Poisson 方程式！) このため $\chi(r)\sim r^{-l}$ は，そもそも微分方程式の解を与えないのである(後の§16.4を参照)．こうして，一般に

$$\chi(r)\underset{r\downarrow 0}{\sim} r^{l+1}\tag{5.4.9}$$

でなければならないことがわかった．

b) 遠方での振舞い

$\chi(r)$ の遠方 $r\to\infty$ での振舞いは ε の正負によってちがう．(5.4.7)において $r\to\infty$ で $U(r)\to 0$ だから，大雑把にいえば

$$\chi(r)\underset{r\to\infty}{\sim}\begin{cases} A\sin(\sqrt{\varepsilon}\,r+\beta) & \varepsilon>0\\ Ae^{-\sqrt{-\varepsilon}r}+Be^{\sqrt{-\varepsilon}r} & \varepsilon<0\\ Ar^{-l}+Br^{l+1} & \varepsilon=0\end{cases}\tag{5.4.10}$$

となる．ただし，A, B, β は定数．$\varepsilon=0$ の場合はポテンシャルが強い条件IIを満たすとして書いた．しかし，(5.4.10)の振舞いは，$r\to\infty$ で $U(r)$ が0にゆく速さによるはずだろう．

その状況を見るため，$\varepsilon>0$ の場合を例にとって定数変化法でしらべてみよう．(5.4.10)の A, β を r の関数と見直して，これらを

$$\chi(r) = A(r)\sin\varphi(r), \qquad \varphi(r) \equiv \sqrt{\varepsilon}\, r + \beta(r)$$

が(5. 4. 7)を満たすように決めるのだ．しかし，方程式1つに対して未知関数2つは多すぎるので，$'$ で r に関する微分を表すものとして

$$\chi' = \sqrt{\varepsilon}\, A\cos\varphi + A'\sin\varphi + \beta' A\cos\varphi$$

の後半分が0という要求を加える．すなわち

$$A'\sin\varphi + \beta' A\cos\varphi = 0.$$

そうすると(5. 4. 7)は

$$A'\cos\varphi - \beta' A\sin\varphi = (U/\sqrt{\varepsilon})\, A\sin\varphi$$

を与えるから，これら2式を連立させて解けば

$$A' = (U/\sqrt{\varepsilon})\, A\sin\varphi\cos\varphi, \qquad \beta' = -(U/\sqrt{\varepsilon})\sin^2\varphi.$$

したがって

$$A(r) = \exp\left[(1/2\sqrt{\varepsilon})\int^r U(s)\sin 2\{\sqrt{\varepsilon}\, s + \beta(s)\}\, ds\right]$$

$$\beta(r) = -(1/\sqrt{\varepsilon})\int^r U(s)\sin^2\{\sqrt{\varepsilon}\, s + \beta(s)\}\, ds.$$

ところが sin 関数の値は絶対値において1を越えないので，ポテンシャルが条件 I さえ満たせば $r\to\infty$ で積分は絶対収束し，$A(r)$ も $\beta(r)$ も一定値におちつくことになる．たしかに，$\chi(r)$ は(5. 4. 10)の第1行のように振舞うのである．

しかし，条件 I に反して V が Coulomb ポテンシャルを含むと，$\beta(r)$ が——上の積分表示で $\sin^2\varphi$ を $(1-\cos 2\varphi)/2$ と書いてみればわかるとおり——$\log r$ を含み，$r\to\infty$ で一定値におちつくことがない．これは(5. 4. 10)が単なる“$r\to\infty$ で $U(r)\to 0$”からは言えないことを示す．$\beta(r)$ において $\sqrt{\varepsilon}\, r$ に $\log r$ が加わることは，$r\to\infty$ では小さな補正にすぎないが，散乱理論には影響するところがある(次の節を参照)．

読者は，(5. 4. 10)の $\varepsilon\leqq 0$ の場合を吟味せよ．

(5. 4. 10)で $\varepsilon<0$ の場合，$B\neq 0$ であると規格化可能の条件(5. 4. 5)に遠方で違背するので，そのような $\chi(r)$ は量子力学的の状態を表すことができない．もし $B=0$ であれば，その問題はなく，粒子の存在確率密度 $|\chi(r)|^2$ は遠方で速かに消えて，同時に(5. 4. 9)が成り立っていれば

$$\int_0^\infty |\chi(r)|^2 dr < \infty \tag{5.4.11}$$

となる．このような $\chi(r)$ は，粒子が力の中心に束縛され遠方に飛び去ることのない状態を表す．**束縛状態**である．(5.4.10) の $\varepsilon=0$ の場合も同様．しかし，$B=0$ と (5.4.9) が同時に成り立つということは，勝手な ε ではおこらない．その条件は次の項で詳しくしらべる．

(5.4.10) の $\varepsilon>0$ の場合，$\chi(r)$ は $r\to\infty$ の遠方までおよぶ存在確率密度を与え，粒子が遠方からきて力の中心に近づき，再び遠方に飛び去るという**散乱状態**を表す．事実，その $\chi(r)$ に時間因子 $e^{-i\omega t}$ $(\omega\equiv E_{\nu l}/\hbar)$ をつけて

$$\chi(r) \underset{r\to\infty}{\sim} (iAe^{-i\beta}/2)[e^{-i(\sqrt{\varepsilon}r+\omega t)}-e^{2i\beta}e^{i(\sqrt{\varepsilon}r-\omega t)}] \tag{5.4.12}$$

と書いてみれば，第1項は力の中心に向って‘入ってくる波’を表し，第2項は位相のずれ 2β を蒙って外に向って‘出てゆく波’を表している．散乱の量子力学的な記述を定式化することは d) 項でおこなう．

c) 束縛状態†

$\chi(r)$ の振舞いが原点付近では (5.4.9) のようであり，遠方では (5.4.10) の第2行または第3行で $B=0$ とおいたものであるならば，これは束縛状態を表す．しかし，この両者が同時に成り立つということは勝手な ε ではおこらない．(5.4.8) が必要なことは，すでに見た．これが十分でないことは，$r\sim0$ の (5.4.9) から始めて微分方程式 (5.4.7) を $r\to\infty$ にむかって数値的に解いてゆくとすれば想

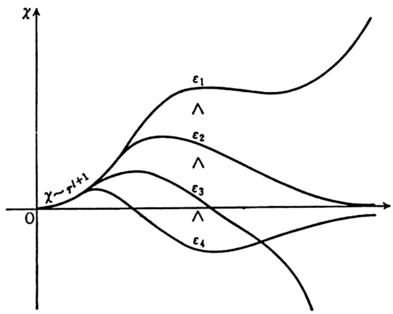


図 5.18　固有値さがし

† この項の解析はポテンシャルが $r\to\infty$ で正の無限大にゆく場合にも通用する．

像されるだろう．$\chi(r)$ を r に対して描いたグラフの接線の勾配の変化率 $d^2\chi/dr^2$ が，(5.4.7)によれば各点 r で $[\varepsilon-U(r)]\chi(r)$ によって決まるから，つまり ε の値によって制御されるのだ(図5.18)．制御がうまくいって(5.4.9)の $\chi(r)\sim r^{l+1}$ から始まったグラフが $r\to\infty$ でめでたく r 軸に接近してゆくなら，そのときの ε が束縛状態のエネルギーを与える．その状況を詳しくしらべよう．$\varepsilon<0$ とする．

微分方程式(5.4.7)の $r>0$ における解で，$r\downarrow 0$ のとき r^{-l} のように振る舞うものを $v_1(r)$ とし，r^{l+1} のように振る舞うものを $v_2(r)$ とする．すなわち

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\varepsilon-U(r)\right]v_1=0, \qquad v_1 \underset{r\downarrow 0}{\sim} r^{-l}/\sqrt{2l+1}$$

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\varepsilon-U(r)\right]v_2=0, \qquad v_2 \underset{r\downarrow 0}{\sim} r^{l+1}/\sqrt{2l+1}$$

$r\downarrow 0$ の漸近形に $1/\sqrt{2l+1}$ を掛けたのは，次に計算するロンスキアンを簡単にするためだ．これらの漸近形からはじめて r の大きいほうに微分方程式の解を数値解法で延ばしてゆくと考えれば，$v_1(r)$ も $v_2(r)$ も実数値関数であることがわかる．

さて，上の v_2 の微分方程式に v_1 を掛け，v_1 の方程式には v_2 を掛けて辺々引くと

$$0=v_1\frac{d^2v_2}{dr^2}-v_2\frac{d^2v_1}{dr^2}=\frac{d}{dr}\left[v_1\frac{dv_2}{dr}-v_2\frac{dv_1}{dr}\right]$$

が得られ

$$v_1\frac{dv_2}{dr}-v_2\frac{dv_1}{dr}=\text{const.}=1$$

が知れる．ただし，const. の値は v_1, v_2 の $r\downarrow 0$ における漸近形から求めた．この

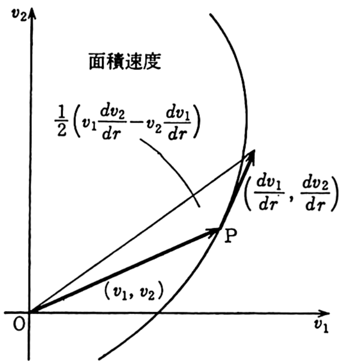


図5.19 r を時間に見たて，v_1, v_2 平面上で点P：$(v_1(r), v_2(r))$ の運動を考えると，ロンスキアン $W(v_1, v_2)$ は面積速度の2倍になる．2つの関数 v_1, v_2 が1次従属とは点Pが原点をとおる直線上を動くことであって，面積速度 $\neq 0$ とは両立し得ない．

v_1, v_2 の微分方程式は点Pが中心力をうけて運動することを示すもので，面積速度 $W(v_1, v_2)$ は一定になる．

式の左辺を関数 v_1, v_2 のロンスキアンといって $W(v_1, v_2)$ と記す．その値が $\neq 0$ である点の近傍では2つの関数は1次独立であり，逆もまた真である(図5.19)．

これからの議論には，上の2つの実数値関数 v_1, v_2 から複素数値関数

$$z(r\,;\varepsilon) = v_1(r) + iv_2(r)$$

を定義しておくのが便利である．$W(v_1, v_2) \neq 0$ だから z は決して0にならない．$z(r\,;\varepsilon)$ とその共役複素 $z^*(r\,;\varepsilon)$ が(5.4.7)の独立な解となり，

$$W(z^*, z) \equiv z^*\frac{\partial z}{\partial r} - z\frac{\partial z^*}{\partial r} = 2i.$$

これを z の極形式

$$z(r\,;\varepsilon) = w(r\,;\varepsilon)\exp[i\theta(r\,;\varepsilon)] \qquad (w \text{ と } \theta \text{ は実数値関数})$$

に対して計算すると，図5.19の示す面積速度一定から予想されるとおり，$\partial\theta/\partial r = 1/w^2$ となるから $r\downarrow 0$ で $\theta\to 0$ となることを考慮して

$$\theta(r\,;\varepsilon) = \int_0^r \frac{dr'}{w^2(r'\,;\varepsilon)}. \tag{5.4.13}$$

そこで，z と z^* の1次結合をつくり，微分方程式(5.4.7)の一般解を，規格化定数は別として，

$$\chi(r\,;\varepsilon) = w(r\,;\varepsilon)\sin[\theta(r\,;\varepsilon) - \alpha] \tag{5.4.14}$$

と書くことができる．α は任意の実定数．

この(5.4.14)に条件(5.4.9)，すなわち

$$\chi(r\,;\varepsilon) \underset{r\downarrow 0}{\sim} r^{l+1} \tag{5.4.15}$$

を要求すると

$$\alpha = 0$$

となり，これで χ は完全に定まってしまった．この α に π の整数倍を加えてもよいが，高々 χ の符号を変えるにすぎないから問題にしないことにしよう．それでは，この $\chi(r\,;\varepsilon)$ は $r\to\infty$ でどのように振舞うか？ その振舞いは ε を変えたらどのように変わるだろうか？ これがわれわれの調べたいと思っていた問題であった．

$w^2 = |z|^2$ を構成している v_1, v_2 は，微分方程式(5.4.7)の1次独立な解だから，少なくとも一方が $r\to\infty$ で $e^{\sqrt{-\varepsilon}r}$ のように発散する．したがって(5.4.14)も発散——といえないのは $\sin\theta(r\,;\varepsilon)\to 0$ となるかもしれないからである．事実，

$$N(\varepsilon) \equiv \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{dr'}{w^2(r';\varepsilon)} \qquad (5.4.16)$$

が正の整数となるとき，そして，そのときにかぎって

$$\chi(r;\varepsilon) \underset{r\to\infty}{\sim} Ae^{-\sqrt{-\varepsilon}r} \qquad (5.4.17)$$

となる．つまり

$$N(\varepsilon) = n+1 \qquad (n=0, 1, 2, \cdots) \qquad (5.4.18)$$

を満たす ε の値 ($\equiv\varepsilon_n$) で，そして，その値でだけ Schrödinger 方程式(を変形した) (*5.4.7*) は束縛状態の要件 (*5.4.9*), (*5.4.11*) を満足する解をもつのである．この場合，動径方向の運動を指定する量子数 ν としては (*5.4.18*) の n をもちいるのがよい: $\chi(r;\varepsilon_n)\equiv\chi_{nl}(r)$.

この n は単純な意味をもっている．χ の表式 (*5.4.14*) において，sin 関数の引数 $\theta(r;\varepsilon)$ は $r\downarrow 0$ での値 0 から r と共に単調に増大して $r\to\infty$ で $N(\varepsilon)\pi$ に達する．その間 $w=|z|$ は決して 0 にならないから，χ の $r\in(0,\infty)$ における零点——節(フシ)(node) という——の数が $n=N(\varepsilon)-1$ になる．$\varepsilon\neq\varepsilon_n$ の場合にも，同様にして，χ の節の数は $N(\varepsilon)$ の整数部分に等しいことがわかる．

下に証明するとおり，$N(\varepsilon)$ は ε の単調増大関数である．ε が十分に小さければ，(*5.4.8*) のところで説明した理由から $\chi(r;\varepsilon)$ は節をもたないので $N(\varepsilon)<1$. そこから ε を増やしはじめて，もし $N(\varepsilon_0)=1$ となる ε_0 が見つかれば，これが基底状態のエネルギーを与える．さらに ε を増せば $N(\varepsilon)$ も増加するが，もし $N(\varepsilon_1)=2$ となる ε_1 に出会えば，これが第1励起状態のエネルギーを与える．… いま考えているのは (*5.4.3*) の形の波動関数だから，基底状態，第1励起状態，…といっても角運動量が l の部分空間のなかでのことである．$N(\varepsilon)$ は ε が増せば真に増大するから，角運動量の定まった部分空間では，動径方向の運動にエネルギーの縮退はないことがわかる．

もちろん，ポテンシャルによっては $N(\varepsilon)$ が正整数をとる ε が1つもないということもおこるだろう．そのようなポテンシャルは，角運動量 l の束縛状態をもたないのである．

さて，$N(\varepsilon)$ の単調増大を証明しよう．(*5.4.13*) を ε で微分すると

$$\frac{\partial\theta(r;\varepsilon)}{\partial\varepsilon} = -\int_0^r \left[\frac{\partial z}{\partial\varepsilon}z^* + z\frac{\partial z^*}{\partial\varepsilon}\right]\frac{1}{w^4}dr' \qquad (5.4.19)$$

この右辺の積分を計算するために，$[d^2/dr^2+\varepsilon-U]z=0$ を ε で微分して得る方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\varepsilon-U\right]\frac{\partial z(r\,;\varepsilon)}{\partial\varepsilon}=-z(r\,;\varepsilon)$$

を定数変化法で解くことにしよう．すなわち，b)項でしたのと同様に

$$\frac{\partial z(r\,;\varepsilon)}{\partial\varepsilon}=A(r)z(r)+B(r)z^*(r)$$

の係数 A, B を定める．右辺の $z(r)$ は $z(r\,;\varepsilon)$ の略記である．v_1, v_2 の境界条件は ε に無関係なので $\lim_{r\downarrow 0}\partial z/\partial\varepsilon=0$．このことを考慮して

$$\frac{\partial z(r\,;\varepsilon)}{\partial\varepsilon}=\frac{i}{2}\left[z(r)\int_0^r|z(r'')|^2dr''-z^*(r)\int_0^r z(r'')^2dr''\right]$$

を得る．これを(5.4.19)に代入し，z を極形式に直せば

$$\frac{\partial\theta(r\,;\varepsilon)}{\partial\varepsilon}=\int_0^r dr'\frac{1}{w^2(r')}\int_0^{r'}dr''w(r'')^2\sin 2[\theta(r')-\theta(r'')].$$

積分の順序をかえて

$$\frac{\partial\theta(r\,;\varepsilon)}{\partial\varepsilon}=\int_0^r dr''w^2(r'')\int_{r''}^r\frac{dr'}{w(r')^2}\sin 2[\theta(r')-\theta(r'')]$$

とすると，第1の r' 積分は(5.4.13)の微分形 $d\theta(r')=dr'/w^2(r')$ を利用して実行できる．その結果

$$\frac{\partial\theta(r\,;\varepsilon)}{\partial\varepsilon}=\int_0^r dr''w^2(r'')\sin^2[\theta(r)-\theta(r'')]$$

を得て，$\theta(r\,;\varepsilon)$ の ε に関する単調増大がいえる．$r\to\infty$ にとれば $N(\varepsilon)$ の単調増大(真に増大！)がいえて，証了．

第 n 励起状態の動径関数が n 個の節をもつという上に見た事実から，ポテンシャル $V(r)$ に対して角運動量 l をもつ束縛状態の数 b_l の上限を与える **Bargmann の評価式**

$$b_l\leqq\frac{1}{2l+1}\int_0^\infty r|U_0(r)|dr\qquad\left(U_0(r)\equiv\frac{2\mu}{\hbar^2}V(r)\right)\qquad(5.4.20)$$

を導くことができる．ただし，ポテンシャルは条件IIを満たすものとする．このとき右辺の積分は有限である．ここではゼロ・エネルギーの束縛状態はないと仮定して議論しよう．それがあっても(5.4.20)は成り立つのだが….

ポテンシャルをどこかで少しでも深くすれば束縛状態のエネルギーは必らず下がるから(§5.7 の変分法を参照)，ポテンシャル $V(r)$ のもつ束縛状態の数 b_l は $-|V(r)|$ のもつ数 b_l' を越えない．ところが，この b_l' は最高エネルギー束縛状態の動径関数がもつ節の数より 1 だけ大きく，(その状態のエネルギーは仮定により <0 だから) $\varepsilon=0$ として書いた Schrödinger 方程式

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\phi(r) = -|U_0(r)|\phi(r) \qquad (5.4.21)$$

の解 ϕ がもつ節の数に等しい(図 5.18 を参照)．ただし，$r\downarrow 0$ で $\phi\sim r^{l+1}$ とする．

方程式(5.4.21)は，もし右辺$=0$ だったら r^{l+1} と r^{-l} を独立な解としてもつ．右辺を非斉次項のようにみて定数変化法により解を求めれば

$$\phi(r) = r^{l+1}-\frac{1}{2l+1}\int_0^r H(r,s)|U_0(s)|\phi(s)\,ds \qquad (5.4.22)$$

となる．ただし

$$H(r,s) = r(r/s)^l - s(s/r)^l. \qquad (5.4.23)$$

この ϕ の節を $r_1<r_2<\cdots<r_{b_l}$ とし，$r_0\equiv 0$ とおいて

$$2l+1 < \int_{r_{k-1}}^{r_k} r|U_0(r)|dr \qquad (k=1,2,\cdots,b_l) \qquad (5.4.24)$$

を証明しよう．これを $k=1$ から b_l まで辺々加え合わせれば(5.4.20)が得られるのである．

まず $b_l=1$ の場合．r 軸上の開区間 $I_1=(0,r_1)$ では $\phi>0$ だから，$r>s$ では $H(r,s)>0$ であることに注意して，$\phi\leqq r^{l+1}$．そこで，(5.4.22)で $r=r_1$ とおけば

$$r_1^{\,l+1} \leqq \frac{1}{2l+1}\int_0^{r_1} H(r_1,s)|U_0(s)|s^{l+1}ds.$$

両辺を $r_1^{\,l+1}/(2l+1)$ で割り，この積分領域 I_1 上で

$$(s^l/r_1^{\,l+1})H(r_1,s) = 1-(s/r_1)^{2l+1} \leqq 1$$

が成り立つことに注意すれば，$k=1$ の(5.4.24)が得られる．

$b_l=2$ の場合．$k=1$ の(5.4.24)が成り立つことは上と同様にして証明される．$k=2$ の積分領域 I_2 では，微係数 $\phi'(r_1)\neq 0$ を利用して ϕ の代りに

$$\bar{\phi}(r) \equiv \phi(r)/\phi'(r_1)$$

を考えると，$\bar{\phi}(r_1)=0$，$\bar{\phi}'(r_1)=1$ となる．また I_2 上で $\bar{\phi}(r)\geqq 0$．したがって再

び定数変化法により

$$\bar{\phi}(r)=\frac{1}{2l+1}H(r,r_1)-\frac{1}{2l+1}\int_{r_1}^{r}H(r,s)|U_0(s)|\bar{\phi}(s)\,ds \qquad (5.4.25)$$

が得られる．I_2 上では $\bar{\phi}(r)\geqq 0$ だから積分は >0 なので $\bar{\phi}(r)\leqq H(r,r_1)/(2l+1)$．よって，(5.4.25) で $r=r_2$ とおくとき

$$(2l+1)H(r_2,r_1)\leqq\int_{r_1}^{r_2}H(r_2,s)H(s,r_1)|U_0(s)|ds.$$

ところが，定義 (5.4.23) から簡単に

$$H(r_2,s)H(s,r_1)\leqq s[H(r_2,r_1)-Y(r_2,r_1)]<sH(r_2,r_1)$$

が証明されるので，$k=2$ の (5.4.24) が得られる．ここに

$$Y(r_2,r_1)\equiv 2(r_1r_2)^{1/2}[1-(r_1/r_2)^{l+1/2}]>0$$

である．こうして，$b_l=2$ の場合がすんだ．

$b_l=3,4,\cdots$ の場合も，まったく同様に扱うことができ，(5.4.20) の証明が完結する．

ポテンシャル $U_0(r)=-(2l+1)\delta(r-a)/r$ に対して (5.4.20) の等号が成り立つ．この場合，束縛状態はゼロ・エネルギーのもの1つである．しかし，(5.4.20) の右辺を無限大にするポテンシャルでも束縛状態を無限個もつとはかぎらない．後に，井戸型ポテンシャルの場合に実際の束縛状態の数と Bargmann の評価との比較を図 5.23 に示す．

d)　井戸型ポテンシャル

井戸型ポテンシャル(図 5.20)は，そのままで現実的とはいえないが，解析的に

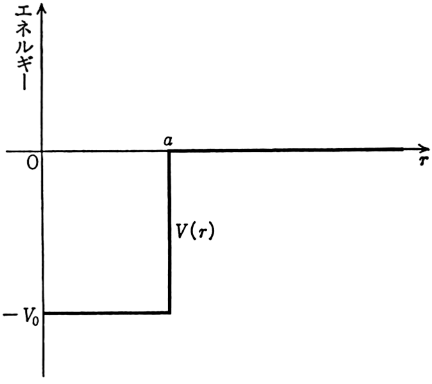


図 5.20　井戸型ポテンシャル．
$V_0<0$ とすれば斥力型になる．

扱える短距離ポテンシャルの典型である．これをとれば，動径関数 R_l に対する方程式(5.4.4)は

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho}+1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R_l=0 \qquad (5.4.26)$$

と書ける．ただし，ポテンシャルの

$$\left.\begin{aligned}&\text{内部}(r<a)\text{では}\quad \rho\equiv\alpha r,\quad \alpha=\left[\frac{2\mu(E+V_0)}{\hbar^2}\right]^{1/2}\\ &\text{外部}(r>a)\text{では}\quad \rho\equiv i\beta r,\quad \beta=\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2e^{\pi i}}\right]^{1/2}\end{aligned}\right\} \qquad (5.4.27)$$

とし，$R_{\nu l}$, $E_{\nu l}$ とすべきところの添字を簡略にした†.

方程式(5.4.26)の解は，一般に

$$R_l(\rho)=\rho^l\int_{\mathrm{C}}e^{i\rho s}(1-s^2)^l ds$$

という複素 s 平面上の積分で与えられる．積分路Cは，その両端での値の差を $|_{\mathrm{C}}$ で表すとき，R_l が(5.4.26)を満たすことを代入して確かめるには部分積分が必要なので，

$$e^{i\rho s}(1-s^2)^{l+1}|_{\mathrm{C}}=0$$

となるように定める．Cのとりかたに応じて，球 Bessel 関数

$$j_l(\rho)=\frac{1}{2}\frac{\rho^l}{2^l l!}\int_{-1}^{1}e^{i\rho s}(1-s^2)^l ds \qquad (5.4.28)$$

や，球 Hankel 関数

$$h_l^{(1)}(\rho)=-\frac{\rho^l}{2^l l!}\int_{1}^{i\infty}e^{i\rho s}(1-s^2)^l ds,\qquad h_l^{(2)}(\rho)=\frac{\rho^l}{2^l l!}\int_{-1}^{i\infty}e^{i\rho s}(1-s^2)^l ds \qquad (5.4.29)$$

が生ずる(図5.21)．ただし後の2つの表式では $\mathrm{Re}\,\rho>0$ とした．複素 ρ 平面上で他の領域にゆくには解析接続をする．

2階の微分方程式(5.4.26)の独立な解は2つだから，上記3種の関数から適宜2種を選んでもちいれば十分である．実際，図5.21のように積分路をつないで考えれば

---

† $\beta=\beta(E)$ は，実軸の正の部分に切断を入れた複素 E 平面上の関数としてあつかう．$E<0$ のときには $E=|E|e^{i\pi}$ とみるのである．

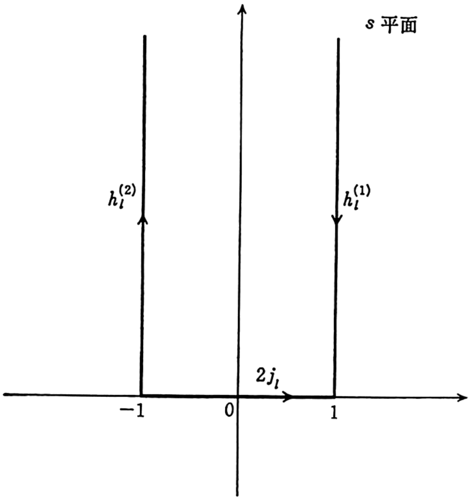


図 5.21　球 Bessel 関数の間の関係. $h_l^{(1)}$ の積分路を下って $2j_l$ の路を逆行し $h_l^{(2)}$ の路を上ると無限遠で閉じた曲線ができて (5.4.30) が証明される.

$$j_l(\rho)=\frac{1}{2}[h_l^{(1)}(\rho)+h_l^{(2)}(\rho)] \qquad (5.4.30)$$

が知れる. ρ が実数のとき, $h_l^{(1)}$ と $h_l^{(2)}$ はたがいに複素共役だから, j_l はそれらの実数部分である. $h_l^{(1)}$ の虚数部分を n_l と書いて球 Neumann 関数という.

具体例を (5.4.28), (5.4.29) から求めておこう (図 5.22 参照).

$$j_0(\rho)=\frac{\sin\rho}{\rho}, \qquad h_0^{(1)}(\rho)=-i\frac{e^{i\rho}}{\rho}$$

$$j_1(\rho)=\frac{\sin\rho}{\rho^2}-\frac{\cos\rho}{\rho}, \qquad h_1^{(1)}(\rho)=-\left(\frac{1}{\rho}+\frac{i}{\rho^2}\right)e^{i\rho}$$

$$j_2(\rho)=\left(\frac{3}{\rho^3}-\frac{1}{\rho}\right)\sin\rho-\frac{3}{\rho^2}\cos\rho, \qquad h_2^{(1)}(\rho)=\left(\frac{i}{\rho}-\frac{3}{\rho^2}-\frac{3i}{\rho^3}\right)e^{i\rho}.$$

上の解のうちで動径関数の原点における境界条件 $R_l\sim r^l$ ($R_l=\chi/r$; (5.4.9) を参照) を満たすのは (5.4.28) のみである. 実際

$$j_l(\rho)\underset{\rho\to 0}{\sim}\frac{1}{2}\frac{\rho^l}{2^l l!}\int_{-1}^{1}(1-s^2)^l ds=\frac{\rho^l}{(2l+1)!!} \qquad (5.4.31)$$

となるのに反して, (5.4.29) の積分では ρ が小さいと大きな s から圧倒的な寄与がきて

$$h_l^{(1)}(\rho)\underset{\rho\to 0}{\sim}-\frac{\rho^l}{2^l l!}\int_1^{i\infty}e^{i\rho s}(-s^2)^l ds\sim -i\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}} \qquad (5.4.32)$$

となる．したがって，A_l を規格化定数として

$$R_l(r) = A_l j_l(\alpha r) \qquad (r<a) \tag{5.4.33}$$

遠方での境界条件(*5.4.10*)は，束縛状態か散乱状態かによってちがう．

束縛状態 ($E\leqq 0$) をまず考えよう．ポテンシャルは引力型とする．$E\leqq 0$ なので(*5.4.27*)の β は実数だから遠方で増大しないのは(*5.4.29*)の $h_l^{(1)}$ であり

$$R_l(r) = B_l h_l^{(1)}(i\beta r). \qquad (r>a) \tag{5.4.34}$$

定数 A_l, B_l は，動径関数が境界 $r=a$ で滑らかにつながることと，波動関数の規格化の 2 つの要求から定まる(共通の定数位相因子をのぞいて)．第 1 の要求は，$r=a$ の内外の対数微係数 $(adR/dr)/R$ の一致

$$\alpha a j_l'(\alpha a)/j_l(\alpha a) = i\beta a h_l^{(1)\prime}(i\beta a)/h_l^{(1)}(i\beta a)$$

といいかえれば，そのままエネルギー固有値 E を定める条件になる．ここに $'$ は微分を表す．この条件を $l=0$ に対して書き下すと，

$$\xi \cot \xi = -\eta.$$

ただし，$\xi\equiv\alpha a$, $\eta\equiv\beta a$．これらに対して(*5.4.27*)から

$$\xi^2+\eta^2 = 2\mu V_0 a^2/\hbar^2.$$

こうして ξ, η に対する連立方程式が得られた．これは以前に 1 次元運動の場合に

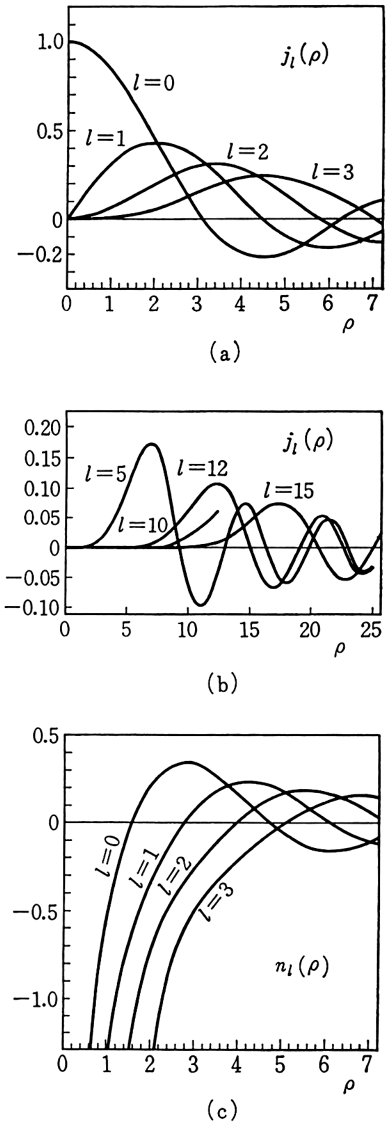


図 5.22　球 Bessel 関数 $j_l(\rho)$ および球 Neumann 関数 $n_l(\rho)$．後者は実数の ρ に対し $h_l^{(1)}(\rho)=j_l(\rho)+in_l(\rho)$ で定義する．

得た(*2. 4. 21*)と同値であり，図2.9によって解かれる．$2\mu V_0a^2/\hbar^2 \geqq (\pi/2)^2$ でなければ束縛状態はなく，$(\pi/2)^2 \leqq 2\mu V_0a^2/\hbar^2 < (3\pi/2)^2$ なら束縛状態は1個，….

$l=1$ に対して，エネルギー固有値 E を定める条件は

$$\frac{\cot\xi}{\xi}-\frac{1}{\xi^2}=\frac{1}{\eta}+\frac{1}{\eta^2}, \qquad \xi^2+\eta^2=\frac{2\mu V_0a^2}{\hbar^2}.$$

V_0a^2 を0から増してゆくと，$\eta=0$ で上式が満たされるとき，すなわち $\cot\xi=\infty$ となるときに新しい固有値が現れる．それは $2\mu V_0a^2/\hbar^2$ が π^2, $(2\pi)^2$, … を越えるときである．

Bargmannの評価(*5. 4. 20*)は，これらの結果に比べた場合，かなりおおまかな評価でしかなく，$|V|$ について線形な評価式の限界を示している(図5.23).

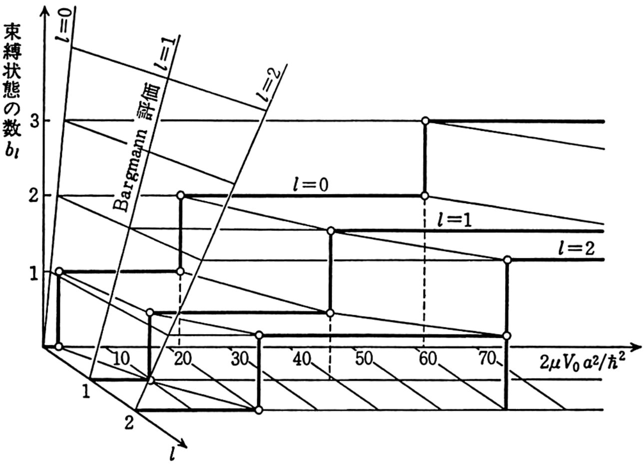


図5.23　井戸型ポテンシャルにおける束縛状態の数とBargmannの評価(*5. 4. 20*)の比較.

散乱状態($E>0$)では，(*5. 4. 27*)の β が虚数になるので，ポテンシャルの外部($r>a$)では

$$\rho = kr, \qquad k=\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right]^{1/2} \tag{5.4.35}$$

とおくことになり，束縛状態の場合とちがって $r>a$ の解を $h_l^{(1)}$ にかぎる理由はない．よって

$$R_l(r) = C_l h_l^{(1)}(kr) + D_l h_l^{(2)}(kr). \qquad (r>a) \tag{5.4.36}$$

これがポテンシャル内部の(5. 4. 33)と境界 $r=a$ で滑らかにつながること，波動関数が全体として(5. 4. 5)の意味で $\delta_{ll'}\delta(k-k')$ に規格化されることの2つの要求から定数 A_l, C_l, D_l が定まる．定めるべき定数が束縛状態の場合より1つ多いので，こんどは $E>0$ は勝手な値でよい．散乱状態のエネルギーは連続スペクトルをなすのである．

いま，ポテンシャルの内側からの対数微係数を

$$\gamma_l \equiv [(a\,dR_l/dr)/R_l]_{r\uparrow a} \tag{5. 4. 37}$$

と書いて，これが(5. 4. 31)から実数となることに注意しておこう．そうなったのはポテンシャルが実数値関数だからであって，これは一般にいえることである．動径関数の接続条件は，ポテンシャル外部の解(5. 4. 36)より

$$\gamma_l = ka\frac{C_l h_l^{(1)\prime}(ka)+D_l h_l^{(2)\prime}(ka)}{C_l h_l^{(1)}(ka)+D_l h_l^{(2)}(ka)}$$

となり，

$$\frac{C_l}{D_l} = \frac{i\{kah_l^{(2)\prime}(ka)-\gamma_l h_l^{(2)}(ka)\}}{-i\{kah_l^{(1)\prime}(ka)-\gamma_l h_l^{(1)}(ka)\}} \tag{5. 4. 38}$$

をあたえる．γ_l が実数だから，この分子，分母はたがいに共役複素であって，$|C_l|=|D_l|$ を 1/2 とおけば——これで R_l の規格化を定めたことになるが

$$C_l = \frac{1}{2}e^{i\delta_l}, \qquad D_l = \frac{1}{2}e^{-i\delta_l} \tag{5. 4. 39}$$

としてよい(共通の位相に量子力学的の意味はない)．ここに

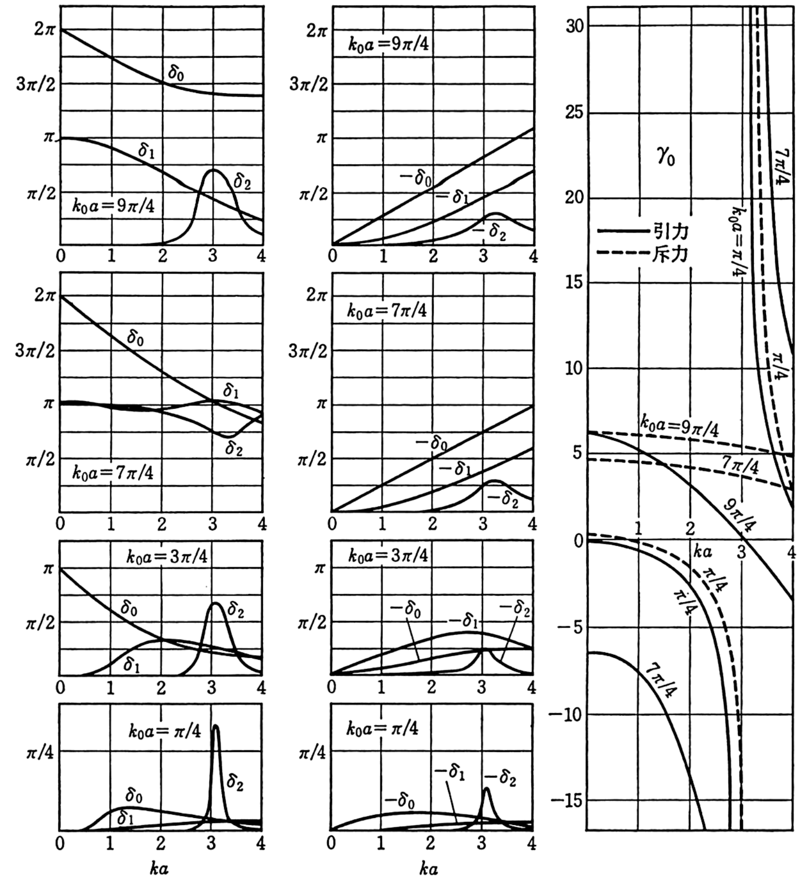
$$\delta_l = \arg i\{kah_l^{(2)\prime}(ka)-\gamma_l h_l^{(2)}(ka)\}.$$

あるいは，実数の引数に対して $h_l^{(2)}$ の実数部分は j_l，虚数部分は $-n_l$ だったから

$$\delta_l = \tan^{-1}\frac{kaj_l'(ka)-\gamma_l j_l(ka)}{kan_l'(ka)-\gamma_l n_l(ka)} \tag{5. 4. 40}$$

としてもよい．この形にすると，散乱ポテンシャルがないとき $\delta_l=0$ となることが一目瞭然である．もっとも，これは(5. 4. 36)，(5. 4. 39)と(5. 4. 30)からすでに明らかであった．弱い引力ポテンシャルを加えると，動径関数が r 軸のほうに引かれる結果 γ_l が自由粒子のときより減るので，δ_l は正になる．斥力ポテンシャルを加えると δ_l は負になる．δ_l を**位相のずれ**とよぶ(図5. 24)．

散乱波は散乱中心からはるか離れたところで観測するのである．$\rho=kr\to\infty$ で



(a) σ_l, 引力ポテンシャルの場合 ($V_0<0$)　(b) σ_l, 斥力ポテンシャルの場合 ($V_0>0$)　(c) γ_0

図 5.24　球対称井戸型ポテンシャルによる位相のずれ σ_l および $l=0$ の対数微係数 γ_0. ポテンシャルの大きさを $|V_0|\equiv\hbar^2k_0^2/2\mu$ により k_0 で表してある. $k\to0$ で $\delta_l\to n\pi\,(n=0,1,2,\cdots)$ となるのは, 井戸型ポテンシャルに限らず, 一般に成り立つことで Levinson の定理とよばれる. ただし, ポテンシャルが零エネルギーの束縛状態をもつときには $\delta_l\to(n+1/2)\pi$ となる.

$h_l^{(1)}(\rho), h_l^{(2)}(\rho)$ はどう振舞うか？ $l=0$ はトリヴィアルだから除き，(5.4.29) を

$$h_l^{(1)}(\rho) = -\frac{\rho^l}{2^l l!}\left(\frac{1}{i\rho}\right)^l \int_1^{i\infty}\left(\frac{d^l}{ds^l}e^{i\rho s}\right)(1-s^2)^l ds$$

と書き直して部分積分をくりかえすと

$$h_l^{(1)}(\rho) = -\left(\frac{1}{2i}\right)^l \int_1^{i\infty} e^{i\rho s}[(1+s)^l - l^2(1-s)(1+s)^{l-1}+\cdots]ds \tag{5.4.41}$$

被積分関数の［　］内の第１項からの寄与は

$$\frac{1}{i\rho}\int_1^{i\infty}\left(\frac{d}{ds}e^{i\rho s}\right)(1+s)^l ds = \frac{1}{i\rho}\Big[e^{i\rho s}(1+s)^l\Big]_1^{i\infty} - \frac{l}{i\rho}\int_1^{i\infty} e^{i\rho s}(1+s)^{l-1}ds$$

と計算してみると，$\rho\to\infty$ では右辺第１項が主要部で，第２項はそれより $1/\rho$ の次数が高い．(5.4.41) にもどり，[…] 内の第２項以下の寄与が小さいことは読者に確かめていただくことにして，漸近公式

$$h_l^{(1)}(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{1}{\rho}e^{i[\rho-1/2(l+1)\pi]} \tag{5.4.42}$$

を得る．複素共役をとれば $h_l^{(2)}$ の式になる．

よって，(5.4.36) は，(5.4.39) も考慮して漸近的に

$$R_l(r) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{2ikr}[-i^l e^{-i(kr+\delta_l)} + i^{-l}e^{i(kr+\delta_l)}] \tag{5.4.43}$$

となる．同じことだが

$$R_l(r) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi+\delta_l\right)$$

と書けば，以前 (5.4.10) で予想した形である．これを (5.4.30) と (5.4.42) から得る

$$j_l(kr) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l}{2}\pi\right) \tag{5.4.44}$$

に比べれば，δ_l を位相のずれとよぶ理由がよりよく納得されるだろう．もし散乱ポテンシャルがなく $V=0$ だったら，動径関数（自由粒子の！）は空間のいたるところでこの $j_l(kr)$ だったはずなのだ．

e）散乱断面積

散乱の実験では，標的に遠方から粒子を入射させ，散乱されて出てくる粒子を

遠方で観測する．量子力学的には粒子は波束で表現されるが，波束の大きさが準備の仕方から想像されるとおり巨視的であるのに対して，de Broglie 波長は微視的なので，その波束を無限にひろがった平面波で代用して差支えない：

$$\psi_{\text{入射}}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}. \tag{5.4.45}$$

$\hbar\boldsymbol{k}$ が入射粒子の運動量であって，エネルギーは $E=\hbar^2k^2/(2\mu)$ となる．

この平面波を，角運動量の定まった球面波の重ね合せとして表現することもできる．$\boldsymbol{k}$ の方向に極軸をとって

$$\psi_{\text{入射}}(\boldsymbol{r}) = e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\,i^l j_l(kr)\,P_l(\cos\theta). \tag{5.4.46}$$

このように，波動関数を角運動量が決まった成分に分けることを**部分波分解**という．こうしたほうが前項までの解析とよくつながるはずだろう．この式を確かめるには，Legendre 関数による展開とみて，展開係数

$$c_l(r) = \frac{2l+1}{2}\int_0^{\pi} e^{ikr\cos\theta}P_l(\cos\theta)\,d(\cos\theta)$$

を計算してみればよい．P_l に (5.2.20) をもちい $kr=\rho$，$\cos\theta=s$ とおいて

$$c_l(r) = \frac{2l+1}{2}\,\frac{(-1)^l}{2^l l!}\int_{-1}^{1}e^{i\rho s}\frac{d^l}{ds^l}(1-s^2)^l ds.$$

部分積分により被積分関数の微分を指数関数のほうにうつすと，(5.4.28) がつかえて $c_l(r)=(2l+1)\,i^l j_l(kr)$ を得る．これで (5.4.46) が証明された．

この入射波 (5.4.46) は，遠方では，(5.4.44) により

$$\psi_{\text{入射}}(\boldsymbol{r}) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left[-i^{2l}e^{-ikr}+e^{ikr}\right]P_l(\cos\theta) \tag{5.4.47}$$

のようにみえる．入射波と名付けはしたが，入ってくる波 e^{-ikr} だけでなく出てゆく波 e^{ikr} も含んでいる．平面波は全空間を満たして進むのだから当然のことだ．しかし，遠方から散乱中心にむかって求心的に進むのは，もちろん入ってくる波の部分であり，これは散乱波に影響されない既知の部分であって，これが正しく表されるように (5.4.43) を——というより角部分つきの (5.4.3) を重ね合せた

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}a_{lm}R_l(r)\,P_l^{m}(\cos\theta)\,e^{im\varphi} \tag{5.4.48}$$

が散乱の実験条件にあった波動関数なのである．いいかえれば，入ってくる波は入射平面波のなかにしかなく，それを $\psi(\boldsymbol{r})$ から除くと出てゆく波だけとなるよ

うにする．これが散乱状態の境界条件である：

$$\psi(\boldsymbol{r}) \underset{r\to\infty}{\sim} e^{ikz}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{5.4.49}$$

この $f(\theta)$ を**散乱振幅**という．

上記の展開係数 a_{lm} は，(5.4.43) と (5.4.47) の入ってくる波の部分を比べて

$$a_{lm} = (2l+1)i^l e^{i\delta_l}\delta_{m,0}.$$

角運動量の z 成分が 0 の部分波しか含まれないという $\delta_{m,0}$ の示す事実は，いま入射粒子が z 軸に沿って走り z 方向に角運動量をもたないのだから当然である．この a_{lm} を係数に (5.4.43) を重ね合せて (5.4.48) の漸近形

$$\psi(\boldsymbol{r}) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)[-i^{2l}e^{-ikr}+e^{2i\delta_l}e^{ikr}]P_l(\cos\theta)$$

を得る．(5.4.49) の形にするには，[…] に $e^{ikr}-e^{ikr}=0$ を加えて

$$\psi(\boldsymbol{r}) \underset{r\to\infty}{\sim} e^{ikz}+\frac{1}{2ikr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)e^{ikr}P_l(\cos\theta)$$

とすればよい．こうして，散乱振幅は事実 θ のみによって φ によらず

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)P_l(\cos\theta) \tag{5.4.50}$$

で与えられる．どの部分波にも位相のずれがなければ(自由粒子！)，当然のことながら $f(\theta)=0$ となる．

さて，(5.4.49) の第 1 項にある入射平面波は，もともと入射波束を近似するものであった．入射波束なら z 軸の近傍に集中して，それ以外の場所にはない．z 軸から離れた位置の散乱粒子検出器には，むろん飛び込まない．だから，検出される散乱粒子の流束 J_r を計算する際には (5.4.49) の第 2 項のみをとるべきである：散乱ポテンシャルを中心とする半径 r の球面上で立体角 $d\Omega$ に単位時間に流れこむ確率は，そこで

$$J_r r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{2\mu}|f(\theta)|^2 d\Omega.$$

他方，入射粒子の確率流束は，(5.4.49) の第 1 項より，z 軸に垂直な面の単位面積あたりで

$$J_z = \frac{\hbar k}{2\mu}.$$

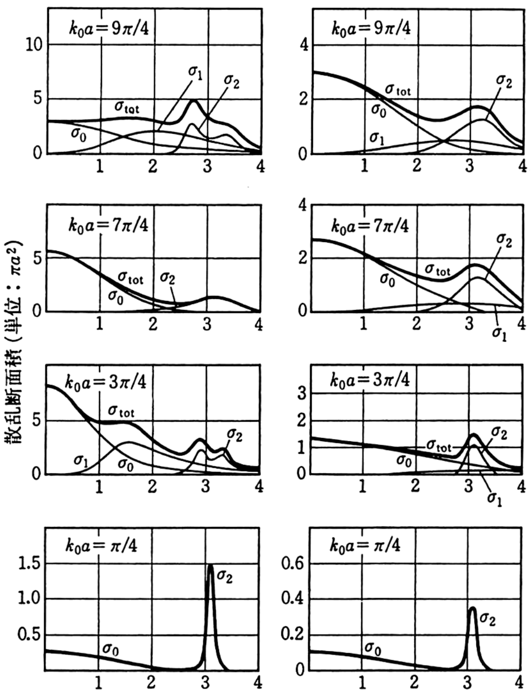
散乱のおこりやすさを表すのに，$J_r r^2 d\Omega$ だけの確率は入射流束がどれだけの面積に当った分か，をいう．その面積 $d\sigma = J_r r^2 d\Omega / J_z$ を単位立体角あたりに直した

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{J_r r^2}{J_z} = |f(\theta)|^2 \qquad (5.4.51)$$

を**散乱の微分断面積**とよぶ．

実際の実験で，入射粒子を z 軸に垂直な単位面積あたり単位時間に I 個ずつ投入すれば，散乱ポテンシャルの中心に対して立体角 $d\Omega$ を張っている検出器は，単位時間に $I\cdot(d\sigma/d\Omega)\cdot d\Omega$ 個，すなわち $I\cdot|f(\theta)|^2\cdot d\Omega$ 個の散乱粒子をうけとることになる．

もし，全立体角にわたって検出器が配置されていれば，それら全体が単位時間にうけとる粒子数は



(a) 引力ポテンシャルの場合 ($V_0>0$)　　(b) 斥力ポテンシャルの場合 ($V_0<0$)

図 5.25　井戸型ポテンシャルによる散乱の全断面積 σ_{tot} の k 依存性．ポテンシャルの大きさを $|V_0| = \hbar^2 k_0^2/2\mu$ により k_0 で示す．$\sigma_l \equiv (4\pi/k^2)(2l+1)\sin^2\delta_l$ は部分波 l の寄与．これがピークをもつのは対応する δ_l が $\pi/2$（または $\pi/2+n\pi$，n=整数）を過ぎるときで，このとき部分波 l が共鳴しているという．$l\neq 0$ では，$ka\leq l$ の低エネルギーの σ_l はほとんど 0 である．

$$\sigma_{\mathrm{tot}}=\int_{\text{全立体角}}\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}d\Omega=2\pi\int_0^{\pi}|f(\theta)|^2\sin\theta d\theta \qquad (5.4.52)$$

の I 倍である．この σ_{tot} を**散乱の全断面積**という(図5.25参照)．(5.4.50)を代入して

$$\sigma_{\mathrm{tot}}=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \qquad (5.4.53)$$

この式の古典力学的解釈を試みよう．遠方での入射粒子の直線軌道と散乱中心との距離を衝突径数とよび，b で表す．この b と粒子の運動量 $\hbar k$ の積が角運動量になるから $(kb)^2=l(l+1)$．そこで，図5.26に示す円輪を通過する入射粒子は角運動量 l をもつと考えてよい．円輪の面積は $2\pi b\varDelta b=(\pi/k^2)\cdot(2l+1)$．これに $4\sin^2\delta_l$ を掛けると，全断面積(5.4.53)の l 番目の項になる．そのうち $0\leqq\sin^2\delta_l\leqq1$ は，円輪を通った粒子が散乱される確率と解釈してよかろう．しかし，因子4が残り，これは量子効果というほかない．

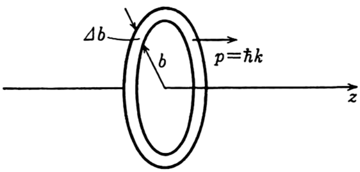


図5.26　部分波の散乱断面積の古典的解釈．$\hbar kb(l)=\sqrt{l(l+1)}\,\hbar$ なる衝突径数 $b(l)$ を定義して，角運動量 l の部分波に半径 $b=b(l)$，幅 $\varDelta b=b(l+1)-b(l)$ の円輪を割り当ててみる．この円輪の面積に散乱確率を掛けたら部分波 l の散乱断面積になるか？

散乱断面積と散乱ポテンシャルの幾何学的な大きさとの関係をみるため，**剛体球による散乱**をしらべる．剛体球とは，ポテンシャルでいえば

$$V(r)=\begin{cases}\infty & r<a\\ 0 & r>a\end{cases}$$

で，そのなかに波動関数はしみこむことができないから，動径関数に対して $R_l(a)=0$ が境界条件である．$[dR_l/dr]_{r\downarrow0}\neq0$ でないと恒等的に $R_l(r)=0$ となるので $r=a$ における対数微係数 γ_l は ∞ としなければならない．こういう場合にも(5.4.40)は使えるので

$$\tan\delta_l=j_l(ka)/n_l(ka).$$

散乱の全断面積(5.4.53)は，したがって

$$\sigma_{\mathrm{tot}}=2\pi a^2\sum_{l=0}^{\infty}\frac{2(2l+1)}{x^2}\frac{j_l^{\,2}(x)}{j_l^{\,2}(x)+n_l^{\,2}(x)} \qquad (x\equiv ka) \qquad (5.4.54)$$

となる．右辺の級数を $l=l_{\max}$ までで打ち切ったときの部分和 σ_{tot}' を $l_{\max}$ の関数として，ka のいろいろの値に対して図 5.27 に示す．見られるとおり，$l_{\max}$ を ka 以上にしても σ_{tot} はほとんど増加しないので，衝突径数 $b=\sqrt{l(l+1)}/k$ が剛体球の半径 a を越える部分波は散乱されないといってよい．

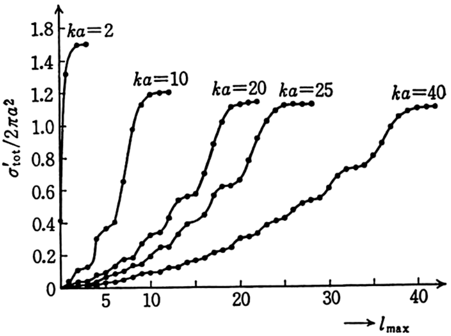


図 5.27　全断面積への部分波断面積の寄与．(5.4.54) の和を $l=l_{\max}$ で打ち切った部分和 σ_{tot} を $l_{\max}$ の関数として示す．これが増加をしぶるところがあるのは，どのように物理的に解釈されるか？

そこで，(5.4.54) の和を $l=ka$ で打ち切り，$ka\gg 1$ の高エネルギー散乱を考えて (5.4.42) から得られる $j_l(x), n_l(x)$ の漸近公式 (5.4.44) などをもちいれば

$$\sigma_{\mathrm{tot}} \cong 2\pi a^2 \sum_{l=0}^{x} \frac{2(2l+1)}{x^2} \sin^2\!\left(x-\frac{l}{2}\pi\right) = 2\pi a^2+O(x^{-1}) \qquad (x\equiv ka\to\infty)$$

この結果は図 5.27 と大体あっている．しかし，$j_l(x)$ などで $l\sim x$ だと x が大きくても，(5.4.44) のような漸近公式は成り立たないから，本当は，もっとていねいに計算しなければならない．

高エネルギーの極限で，散乱の全断面積が散乱体である球の断面積 πa^2 でなく，その 2 倍におちつくことは，実際に球にあたって散乱される波の分と，その散乱のために球の背後にできた影のなかに周囲の波がまわりこむ効果（**影散乱**）の和として理解される．

低エネルギーの極限では，(5.4.31), (5.4.32) からわかるように散乱の全断面積には $l=0$ の部分波のみが寄与し $\sigma_{\mathrm{tot}}=4\pi a^2$ $(ka\to 0)$ となる．

§5.5　Coulomb 場の場合

電荷がそれぞれ $Ze, Z'e$ の 2 粒子がもつ位置エネルギー V は，相互の距離 r に反比例する Coulomb ポテンシャル

$$V = ZZ'e^2/r$$

であって($e=4.8\times10^{-10}$ (c. g. s. e. s. u.)は電気素量)，まえに触れた長距離力の場合になる．これが量子力学的にどんな事態をひきおこすか，詳しく調べてみよう．2粒子の相対座標を(r, θ, φ)として，相対運動に対する定常状態の波動関数を(5. 4. 3)のように書けば，その動径関数に対する方程式(5. 4. 4)は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r+\frac{ZZ'e^2}{r}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}-E\right]R=0 \qquad (5.5.1)$$

となる†．

たとえば，水素原子は陽子($Z'=1$，質量$M=1.67\times10^{-24}$g)と電子($Z=-1$，質量$m=9.1\times10^{-28}$g)からなる系だから，それらの相対運動に対して，この形の方程式が成り立つ．μは換算質量$mM/(m+M)$である．陽子と陽子の散乱といった場合にも，2粒子が核力の到達距離まで接近できない低エネルギー($\lesssim 1$ MeV)領域では，μを換算質量$M/2$として，この方程式をつかうことができる．ただし，同種粒子のしたがう統計について§5.7を参照．

さて，

$$\rho\equiv\kappa r, \qquad \kappa\equiv\left(\frac{8\mu E}{\hbar^2 e^{\pi i}}\right)^{1/2}, \qquad \lambda\equiv -ZZ'\frac{2\mu e^2}{\hbar^2}\frac{1}{\kappa} \qquad (5.5.2)$$

とおいて独立変数をrから無次元のρにかえよう††．

いま仮にμを電子質量mにとり，$Z=Z'=1$とおく．λも無次元であるが，これを$-ZZ'((me^2/2\hbar^2)(e^{\pi i}/E))^{1/2}$と書いたときの

$$\frac{me^4}{2\hbar^2}=13.6 \quad \text{(eV)}$$

は1 Ry(リュードベリ，Rydberg)とよばれ，原子系の標準的なエネルギー値として記憶にあたいする．κは，その定義式で$E=-1$ Ryとおいたとき$2/a_B$となる．ここに

$$a_B=\frac{\hbar^2}{me^2}=0.53\times10^{-8} \quad \text{(cm)}$$

は Bohr 半径にほかならない．$\hbar=e=m=1$にとる**原子単位系**では，a_Bが長さの

† 重心運動を分離する手続きは§5.7で説明する．

†† $\kappa=\kappa(E)$は，(5. 4. 27)の$\beta(E)$と同様に，実軸の正の部分に切断を入れた複素E平面上の関数としてあつかう．

単位に，2 Ry がエネルギーの単位になる．

(5.5.2) をもちいると，方程式 (5.5.1) は

$$\left[\frac{1}{\rho}\frac{d^2}{d\rho^2}\rho-\frac{1}{4}+\frac{\lambda}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0$$

となる．Coulomb ポテンシャルは $\rho=0$ に特異性をもつが，それは遠心力ポテンシャルの特異性より弱いので，§5.4 の一般論から $\rho\sim 0$ で $R\sim\rho^l$．この形は，さいわい $l=0$ でも通用する．他方，$\rho\to\infty$ では上の微分方程式より $R\sim e^{\pm\rho/2}$ となる．そこで

$$R\equiv\rho^l e^{-\rho/2}F \tag{5.5.3}$$

とおけば，

$$\left[\rho\frac{d^2}{d\rho^2}+(2l+2-\rho)\frac{d}{d\rho}-(l+1-\lambda)\right]F=0. \tag{5.5.4}$$

これは合流型超幾何方程式として知られ，$\rho=0$ で正則な解は Kummer の合流型超幾何関数

$$F=F(l+1-\lambda, 2l+2\,;\rho) \tag{5.5.5}$$

で与えられる．この関数は，複素 z 平面上いたるところで絶対収束する級数

$$F(\alpha,\gamma\,;z)\equiv 1+\frac{\alpha}{1!\gamma}z+\frac{\alpha(\alpha+1)}{2!\gamma(\gamma+1)}z^2+\cdots \tag{5.5.6}$$

によって定義されるが，性質を調べるには積分表示

$$F(\alpha,\gamma\,;z)=A\int_C t^{\alpha-1}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}e^{zt}dt, \tag{5.5.7}$$

$$A\equiv\frac{\Gamma(\gamma)}{(1-e^{-2\pi i\alpha})\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma-\alpha)} \tag{5.5.8}$$

も便利なことが多い．ここに掲げたのは，γ が正整数の場合に限って成り立つ表示；積分路 C は複素 t 平面上で切断線 [0, 1] を反時計まわりにかこむ閉曲線である (図 5.28)．被積分関数は α が γ とともに整数でないかぎり多価なので，切断線をいれた．そして，多価関数の分枝を指定するため，t と $1-t$ の偏角を切断線の下岸で 0 と定めておく．

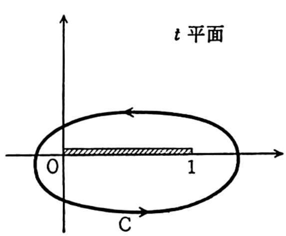


図 5.28 (5.5.7) の積分路

級数(5.5.6)が微分方程式(5.5.4)を満たすことは，項別微分によってわかる．積分表示(5.5.7)が(5.5.6)に一致することを確かめるには，その被積分関数にある e^{zt} をベキ級数に展開し，項別積分してみればよい．そのとき現れる積分は，ひとまず $\alpha+\nu>0$, $\gamma-\alpha>0$ と仮定すれば

$$\int_C t^{\alpha-1+\nu}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}dt = (1-e^{-2\pi i\alpha})\int_0^1 t^{\alpha-1+\nu}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}dt$$

として計算できる．この仮定のもとでは，積分路 C が切断線 [0, 1] の上岸と下岸に沿う道に圧縮できるからである(図 5.29)．右辺の積分はベータ関数となり

$$B(\alpha+\nu,\gamma-\alpha) = \frac{\Gamma(\alpha+\nu)\Gamma(\gamma-\alpha)}{\Gamma(\gamma+\nu)}$$

に等しい．この結果は，解析接続の原理により一般の複素数値の α, γ にたいしても成り立ち，(5.5.7)から級数表示(5.5.6)を導く．

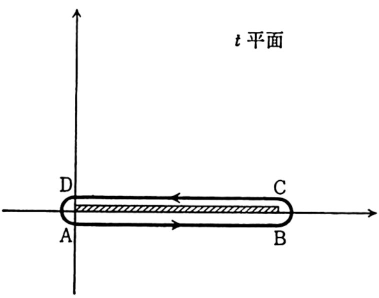


図 5.29 圧縮した積分路．被積分関数の偏角は，t のベクトル表示の矢先が積分路をたどって切断の端 BC をまわるとすれば，下の表のようにして決定される．

	AB 上で(定義)	CD 上で
$\arg t$	0	0
$\arg(1-t)$	0	2π
$\arg[t^{\alpha-1+\nu}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}]$	0	$-2\pi\alpha$

DA をまわるとしても，もちろん同じ結果になる．

a) 束縛状態

ここでは $ZZ'<0$ とする．このとき，Coulomb ポテンシャルは引力型となり，$r\to\infty$ で 0 になるから，束縛状態があるとすれば $E<0$. さきに注記したとおり E は実軸の正の部分に切断をいれた複素平面上で考えるので，(5.5.2)において $\kappa>0$, $\lambda>0$ となる．このとき，$r\to\infty$ で動径関数(5.5.3)はどのように振舞うだろうか？ その振舞いからエネルギー固有値が決定されるはずである．

(5.5.7)で $z=\kappa r\to\infty$ とすると，積分への主な寄与は切断線の右端 $t=1$ の近傍からくる．$1-t=s/z$ で積分変数を s にかえ，t は 1 とおいてしまえば(図 5.30 を参照)

$$F(\alpha,\gamma;z) \underset{z\to\infty}{\sim} Ae^{z}z^{\alpha-\gamma}\int_{C'} s^{\gamma-\alpha-1}e^{-s}ds.$$

この積分は$\Gamma(\gamma-\alpha)$を与えるから

$$F(\alpha,\gamma;z)\underset{z\to\infty}{\sim}\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)}z^{\alpha-\gamma}e^{z}. \qquad (5.5.9)$$

動径関数(5.5.3)は$e^{-\rho/2}$をもつけれども，$\rho\to\infty$でFが(5.5.9)のようにe^{ρ}で増すのでは，束縛状態を表すことはできない．束縛状態を表すためには$1/\Gamma(\alpha)=0$，すなわち

$$\alpha\equiv l+1-\lambda=-n' \qquad (n'=0,1,2,\cdots) \qquad (5.5.10)$$

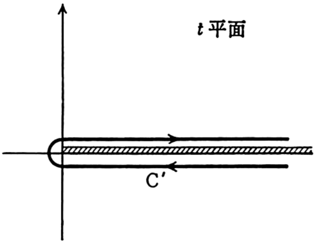


図 5.30

が必要である．これが十分でもあることは，このとき(5.5.6)の級数が有限項で切れてn'次の多項式になることからわかる．この特別の場合のFは，規格化をすこし変えて，Laguerreの多項式とよばれている：

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho)=-\frac{[(n+l)!]^2}{(2l+1)!(n-l-1)!}F(l+1-n,2l+2;\rho). \qquad (5.5.11)$$

ただし，n'の代りにλにあたる$n=n'+l+1$をもちいた．(5.5.2)から，エネルギーEの値は

$$E_n=-(ZZ')^2\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \qquad (n=l+1,l+2,\cdots) \qquad (5.5.12)$$

に限られることがわかる．これがエネルギー固有値である．nは**主量子数**とよばれる．(5.4.3)で導入した状態のラベルνとして，いまの束縛状態については主量子数nをとることができる．状態を(n,l,m)でラベルするのは，極大観測量として$\{H_0,L^2,L_z\}$をとることにほかならない．

固有関数を書き下すために，動径関数

$$R_{nl}(r)=N_{nl}e^{-\rho/2}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \qquad (\rho\equiv\kappa r)$$

の規格化因子N_{nl}を決定しよう．それには，積分表示(5.5.7)からLaguerre多項式の母関数とよばれる

$$\frac{(-s)^p e^{-\rho s/(1-s)}}{(1-s)^{p+1}}=\sum_{q=p}^{\infty}\frac{s^q}{q!}L_q{}^p(\rho) \qquad (5.5.13)$$

をだしておくのがよい．まず，(5.5.8)は$\Gamma(\alpha)\sin\pi\alpha=\pi/\Gamma(1-\alpha)$で書きかえると$\alpha$が負の整数でも使えることに注意し，(5.5.7)から(5.5.11)によって

$$\sum_{q=p}^{\infty}\frac{s^q}{q!}L_q{}^p(\rho)=\sum_{q=p}^{\infty}\frac{(-s)^q}{2\pi i}\int_C t^{p-q-1}(1-t)^q e^{\rho t}dt$$

を導く．右辺の被積分関数は公比 $-s(1-t)/t$ の等比級数をなすので，$|s|$ を十分に小さくとることにより一様収束を保証した上で和をさきにとる．そうすると積分は簡単な留数計算で求められ，(5.5.13) が得られる．

動径関数 R_{nl} の規格化積分を計算するには，母関数 (5.5.13) とその s を s' にかえた式とを辺々かけあわせ必要な因子を掛けて積分して，両辺で s, s' のベキの等しい項を比べる．規格化した固有関数は

$$u_{nlm}(r)=R_{nl}(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) \qquad (5.5.14)$$

ただし $\rho=(2/na_B')r$, $a_B'=(m/\mu|ZZ'|)a_B$ とするとき（この m は電子の質量）

$$R_{nl}(r)=-\left[\left(\frac{2}{na_B'}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n\{(n+l)!\}^3}\right]^{1/2}e^{-\rho/2}\rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho).$$

この 2, 3 を書き下してみよう（図 5.31 参照）．

$$\rho=\frac{2}{a_B'}r:$$

$$R_{10}=\left(\frac{1}{a_B'}\right)^{3/2}2e^{-\rho/2}$$

$$\rho=\frac{1}{a_B'}r:$$

$$R_{20}=\left(\frac{1}{2a_B'}\right)^{3/2}(2-\rho)e^{-\rho/2}$$

$$R_{21}=\left(\frac{1}{a_B'}\right)^{3/2}\frac{1}{2\sqrt{6}}\rho e^{-\rho/2}.$$

Coulomb 場に束縛された運動の固有状態は，こうして n, l, m の 3 つの量子数で指定される．与えられた主量子数 n にたいして，方位量子数 l のとりうる値は

$$l=n-1, n-2, \cdots, 0 \quad \text{の} \quad n\ \text{個}$$

であり，l のそれぞれの値に対して磁気量子数 m が

$$m=-l, -l+1, \cdots, l \quad \text{の} \quad (2l+1)\ \text{個}$$

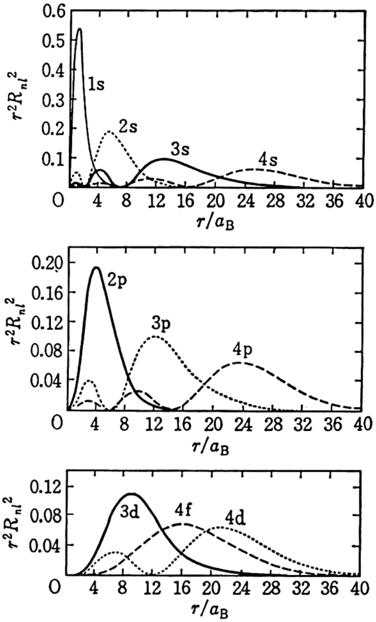


図 5.31　水素原子における動径方向の電子の存在確率密度．s 状態のグラフだけ縦軸方向に 2/5 倍に押し縮めてあるので注意．

だけ可能である．

エネルギー固有値は，ポテンシャルが球対称だから m によらないのは当然だが，いまの場合 l に関しても縮退している．Coulomb 場だけの特殊事情である．その深い意味は第8章で明かされるだろう．このため，エネルギー準位 E_n の縮退は

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2 \text{ (重)}$$

となる．

高いエネルギー準位にいくと，各準位の縮退が急に増すのに加えて，準位そのものが密になる．こちらは長距離力の示す一般的特徴である．これらのことは物理的な帰結をもつだろう．たとえば，水素原子の電子に対して，統計力学のいわゆる分配関数を計算したらどうなるか．エネルギー準位系(*5.5.12*)上の電子の熱分布は如何？

固有関数(*5.5.14*)からも，Coulomb 場における量子力学的運動について多くの物理を読みとることができる．ここでは，力の中心からの距離 r の量子力学的平均値が，対応する古典的楕円軌道についての時間平均とよく一致することを指摘しよう．'対応' という意味は，古典力学的な軌道を Bohr-Sommerfeld の量子条件によって量子化し，同じ量子数をもつ量子力学的固有状態に対応させることである．平均を $\langle\cdots\rangle$ で表し，便宜上，r の単位を $a_B' \equiv a_B/|ZZ'|$ にとって示す．

表 5.5　r^k の期待値

	量子力学 (期待値)	古典力学 (時間平均)
$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle$	$\frac{1}{n^2}$	$\frac{1}{n^2}$
$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle$	$\frac{1}{n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)}$	$\frac{1}{n^3 l}$
$\langle r \rangle$	$\frac{1}{2}[3n^2-l(l+1)]$	$\frac{1}{2}(3n^2-l^2)$
$\langle r^2 \rangle$	$\frac{1}{2}n^2[5n^2+1-3l(l+1)]$	$\frac{1}{2}n^2(5n^2-3l^2)$

ここで $1/r$ の平均が量子力学と古典力学で正確に一致しているのは，ビリアル定理が両方で成り立つからであって，おどろくにはあたらない．これ以外の期待

値では，古典力学からの結果で l を $l+1/2$ にかえると一致がよくなることに注意しよう．これは，いわゆる WKB 近似においては Langer の処方として知られている．なお，古典力学の楕円軌道については，その諸元が量子数によって次のように与えられる．

$$(\text{長半径})/a_B' = n^2, \qquad (\text{短半径})/a_B' = nl, \qquad (\text{離心率}) = \sqrt{1-\frac{l^2}{n^2}}.$$

こうした古典軌道の描像も，r のベキの平均が示す前頁の表のような一致からみて，量子力学においてもある意味をもつとしてよいであろう．パズル：古典軌道の離心率は l が小さいほど高いが，量子力学的には l が小さいほど位置の確率分布は‘まるい’．どうしたことだろう？　なお，r^k の古典力学的な平均値は，M. Born の『原子力学』(土井不曇ほか訳，岩波書店，1935)からとった．量子力学的の期待値は (5.5.12) をつかえば計算できる．

b) 散乱状態

ここでは Z, Z' は正でも負でもよいとする．

$E>0$ の定常状態は散乱を表す．このとき (5.5.2) の κ, λ は虚数になるので，その代りに

$$\kappa = -2ik, \qquad \lambda = -in \qquad (-i=e^{-\pi i/2})$$

で定まる k と n をもちい，$\rho=\kappa r$ は $-2ikr$ とあらわに書く．すなわち

$$k = \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2}\right)^{1/2} > 0, \qquad n = \frac{ZZ'e^2}{\hbar v}. \tag{5.5.15}$$

この k は無限遠における波数であって，対応する粒子の相対速度が $v\equiv\hbar k/\mu$ である．動径関数は (5.5.3) と (5.5.5) によって与えられ

$$R = (-2ikr)^l e^{ikr} F(l+1+in, 2l+2\,; -2ikr). \tag{5.5.16}$$

この関数の $r\to\infty$ における漸近形を調べ，いろいろの l の部分波を重ね合せることによって (5.4.49) のような漸近形をもつ波動関数をつくることが当面の問題である．

Kummer の関数 F の $z=2kre^{-\pi i/2}$，$r\to\infty$ の漸近形を見るためには，積分表示 (5.5.7) の積分路 C を図 5.32 に示す C_1+C_2 に変えるのがよい．いっそ，C_1 と C_2 からの寄与を分けて

$$F=\frac{1}{2}[G_1+G_2] \tag{5.5.17}$$

としよう．すなわち

$$\frac{1}{2}G_i(\alpha,\gamma\,;z)\equiv A\int_{C_i}t^{\alpha-1}(1-t)^{\gamma-\alpha-1}e^{zt}dt$$

とおく．

まず，G_1 をみる．積分変数を $e^{i\pi}zt=s$ に変えれば，積分路 C_1 は図 5.33 の C_1' に変わり

$$\frac{1}{2}G_1(\alpha,\gamma\,;z)$$

$$=A(e^{i\pi}z)^{-\alpha}\int_{C_1'}s^{\alpha-1}\left(1+\frac{s}{z}\right)^{\gamma-\alpha-1}e^{-s}ds.$$

以前に図 5.29 のところで t, $1-t$ の偏角を切断線 [0, 1] の下岸で 0 と定めたことを思いだそう．積分路 C_1' 上の s の偏角は，図 5.33 に示すとおりになる．よって $z=2kre^{-\pi i/2}$, $r\to\infty$ での漸近形は

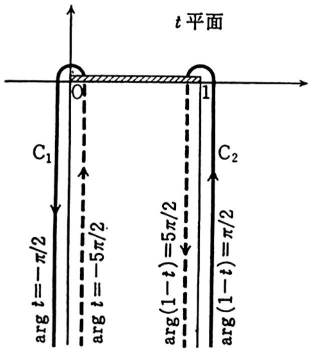


図 5.32　(5.5.16) の積分路．C_1 と C_2 は $\arg zt=-\pi/2$ のとき遠方で e^{zt} が消えるようにとる．破線は，切断線をくぐらせて第 2 の Riemann 面におしやった部分．

$$\frac{1}{2}G_1(\alpha,\gamma\,;z)=\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma-\alpha)}(e^{i\pi}z)^{-\alpha}\left[1+O\left(\frac{1}{z}\right)\right].$$

同様に，変数変換 $z(1-t)=s$ により積分路 C_2 を C_2' に変えれば

$$\frac{1}{2}G_2(\alpha,\gamma\,;z)=\frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)}e^zz^{\alpha-\gamma}\left[1+O\left(\frac{1}{z}\right)\right].$$

これらの漸近形は，一般に $e^{\pi i/2}z$ ≠負の実数で $|z|\to\infty$ のとき成り立つことが知られている．これに (5.5.9) も含まれる；そこに G_1 に当る項がないのは，$z\to\infty$ では e^z をもつ G_2 が G_1 を圧倒するからである．

上の結果から，動径関数 (5.5.17) の漸近形は

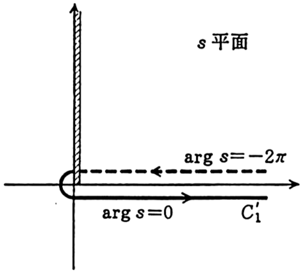


図 5.33　(5.5.17) の積分路

$$R_l \underset{r\to\infty}{\widetilde{\quad}} \frac{1}{2ikr}\left[e^{i(l+1)\pi}e^{-i(kr-n\log 2kr)}+\frac{\Gamma(l+1+in)}{\Gamma(l+1-in)}e^{i(kr-n\log 2kr)}\right] \quad (5.5.18)$$

となる．ただし，定数係数 $A\equiv -e^{-il\pi/2}e^{\pi n/2}\Gamma(2l+2)/\Gamma(l+1+in)$ をおとし，R に添字 l をつけた．この R_l の第1項は入ってくる波を表し，第2項が出てゆく波を表す——と言いきるには指数関数の肩にみえる $\log 2kr$ が気がかりだ．その意味を調べることは，しかし，後の c) 項にまわそう．$\log kr$ は，r が増してゆくとき，kr よりはるかにゆっくりとしか変わらないし，$r\to\infty$ では相対的に無限小になってしまうから，ひとまず無視する．そうすれば，$R_l(r)P_l(\cos\theta)$ を重ね合せて，入ってくる波の部分を入射平面波にあわせることができ，§5.4 e) に説明したように，出てゆく波の部分を入射平面波のそれと比べて散乱波が求まることになる．(5.4.50) によって散乱振幅をだせば

$$f(\theta)=\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{\Gamma(l+1+in)}{\Gamma(l+1-in)}P_l(\cos\theta) \qquad (\theta\neq 0). \qquad (5.5.19)$$

散乱行列 S_l あるいは位相のずれ δ_l でいえば

$$S_l(\lambda)=e^{2i\delta_l(\lambda)}=\frac{\Gamma(l+1-\lambda)}{\Gamma(l+1+\lambda)} \qquad (\lambda\equiv -in) \qquad (5.5.20)$$

となる．散乱振幅の式 (5.5.19) において $(e^{2i\delta_l}-1)$ とすべきところで -1 を省いたのは，その寄与が (5.2.28) により $\theta\neq 0$ では消えるからである．$\theta=0$ とすると (5.5.19) は発散してしまう．

散乱行列 (5.5.20) は，λ に関して解析接続すれば

$$\lambda=l+1+n' \qquad (n'=0,1,2,\cdots) \qquad (5.5.21)$$

に極をもつ．この条件式は束縛状態のエネルギーを定める (5.5.10) と同じだ．(5.5.2) の

$$\lambda=-ZZ'\left(\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{e^{\pi i}}{E}\right)^{1/2}$$

により，実軸の正の部分に切断をいれた複素 E 平面にうつると，$\arg(e^{\pi i}/E)^{1/2}$ は $-\pi/2$ と $\pi/2$ の間を動くことになるから，λ が正の実数になるのは $ZZ'<0$ の場合であり，その場合に限る．これは Coulomb ポテンシャルが引力型の場合であって，(5.5.21) で定まる S_l の極の位置は，たしかに束縛状態のエネルギー値 (5.5.12) に一致する．

散乱行列 S_l が束縛状態のエネルギーの位置に極をもつことは (5.5.18) からも

理解できる．S_l が極をもてば(5. 5. 18)の第1項は相対的に消え，第2項は $-2ik=\kappa>0$ により遠方で $e^{-\kappa r/2}$ のように振舞う束縛状態の波動関数になるのである．

さて，(5. 5. 19)はどんな散乱角分布を与えるか．それをみるには，仮に in が小さな負の実数部をもつとして，ベータ関数の積分表示から得られる表式

$$\frac{\Gamma(l+1+in)}{\Gamma(l+1-in)}=\frac{1}{\Gamma(-2in)}\int_0^1 s^{l+in}(1-s)^{-2in-1}ds$$

と，Legendre 関数の母関数(5. 2. 29)とを利用して

$$2ikf(\theta)=\frac{1}{\Gamma(-2in)}\int_0^1\frac{1-s^2}{(s^2-2s\cos\theta+1)^{3/2}}s^{in}(1-s)^{-2in-1}ds \tag{5.5.22}$$

と書く．ほんとうは，和と積分の順序の交換を正当化するために，適当な $|\eta|<1$ をとり，(5. 5. 19)の第 l 項に η^l を掛けて得る $f_\eta(\theta)$ をまず考え，すべての計算が終わったところで $\eta\to1$ の極限をとるようにすべきであった．

(5. 5. 22)は，変数変換の連鎖 $s=e^{i\phi}$，$\sin(\phi/2)/\sin(\theta/2)=y$，$1-y^2=1/x$ により

$$2ikf(\theta)=\frac{\left(2\sin\dfrac{\theta}{2}\right)^{-(2in+2)}}{\Gamma(-2in)}\int_0^1 x^{in}(1-x)^{-in-1/2}dx$$

に帰着される．この右辺の積分はベータ関数

$$B\left(1+in,\frac{1}{2}-in\right)=\frac{\Gamma(1+in)\Gamma\left(\dfrac{1}{2}-in\right)}{\Gamma\left(\dfrac{3}{2}\right)}$$

に等しいから

$$f(\theta)=-\frac{ZZ'e^2}{2\mu v^2}\frac{1}{\sin^2\dfrac{\theta}{2}}e^{-2in\log\sin\theta/2}\frac{\Gamma(1+in)}{\Gamma(1-in)} \tag{5.5.23}$$

が得られる $(\theta\neq0)$．

散乱の微分断面積(5. 4. 51)は周知の Rutherford の公式になる：

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega}=\left(\frac{ZZ'e^2}{2\mu v^2}\right)^2\frac{1}{\sin^4\dfrac{\theta}{2}}.$$

c)　遠方での波の歪み

Coulomb 場における動径波動関数 $R_l(r)$ が $r\to\infty$ でも自由な波に一致しないことを(5.5.18)のところで注意した．このように遠方で波に歪みが残ることは，入射波を平面波にあわせるべく(5.4.46)に相当する重ね合せ

$$\psi=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{-n\pi/2}\frac{\Gamma(l+1+in)}{\Gamma(2l+2)}$$
$$\cdot(2ikr)^l e^{ikr}F(l+1+in,2l+2,-2ikr)P_l(\cos\theta)\qquad(5.5.24)$$

を作っても，もちろん同様である．計算法は後に説明するが，遠方での漸近形を $\psi\underset{r\to\infty}{\sim}\psi_{入射}+\psi_{散乱}$ のように入射波と散乱波にわけて書けば，入射粒子の進行方向を z 軸として

$$\psi_{入射}=e^{i[kz+n\log k(r-z)]}\left[1+\frac{n^2}{ik(r-z)}\right]\qquad(5.5.25)$$

および

$$\psi_{散乱}=f(\theta)\frac{e^{i[kr-n\log 2kr]}}{r}\qquad(5.5.26)$$

となる．

入射波についていうと，その波面は

$$kz+n\log k(r-z)=\text{const.}\qquad(5.5.27)$$

で与えられ，遠方でも平面にならない．このことは，つぎのようにして半古典的にも理解できる(図5.34)．全エネルギー E，衝突径数 b で非常な遠方 $z=z_\infty<0$ を出発した粒子が，ある $z<0$ まできたときもつ運動量は，$r=\sqrt{z^2+b^2}$ がなお十分に大きいなら

$$p=\sqrt{2\mu\left(E-\frac{ZZ'e^2}{r}\right)}\cong p_\infty\left(1-\frac{a}{r}\right)$$

としてよい．ここに $p_\infty\equiv\sqrt{2\mu E}$，$a\equiv ZZ'e^2/2E$．粒子の運動はまだ直線的なので，$z_\infty$ を出発して以来の de Broglie 波の位相の進みは

$$\Phi(z)=\int_{z_\infty}^{z}\frac{dz}{2\pi\hbar/p}\cong\frac{p_\infty}{2\pi\hbar}\int_{z_\infty}^{z}\left(1-\frac{a}{\sqrt{z^2+b^2}}\right)dz$$
$$=\frac{p_\infty}{2\pi\hbar}\left[z-z_\infty-a\log\frac{2|z_\infty|}{\sqrt{z^2+b^2}-z}\right]$$

となる．ただし，最後の行で $|z_\infty|$ に比べて b を無視した．この式から定まる波面

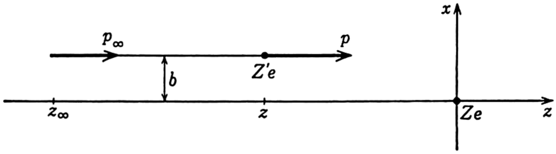


図 5.34 Coulomb 場における波面の歪みの半古典的解釈.

$\Phi(z)=$const. は，まさしく(5.5.27)に一致している.

散乱波についても，もちろん同様のことがいえる．議論を古典力学的にきちんとするには，Hamilton-Jacobi の方程式をつかうとよい．伏見康治，『現代物理学を学ぶための古典力学』(岩波書店，1969)を参照.

この考察から，一般に，$r\to\infty$ で $V(r)=O(1/r^\alpha)$ $(0<\alpha\leqq 1)$ の程度にしか減らないポテンシャルの場では常に，遠方でも波の歪みが残ることが推測される．以前にも§5.4のb)項で論じたことである．このような長距離力ポテンシャルの場合には，だから，位相のずれを散乱行列に結びつけて(5.5.20)のように書いたとしても，その意味は短距離力の場合に§5.4d)で定義したものとすこしちがっている.

さて，波動関数の漸近形(5.5.25)，(5.5.26)を導く計算は，およそ次のとおりである．(5.5.24)の F に積分表示(5.5.7)を用い，ただし積分変数を $\xi\equiv 1-2t$ に変えて(図5.35参照)

$$\psi=-\frac{1}{2}\frac{e^{-n\pi/2}}{1-e^{2n\pi}}\int_{\mathrm{C}}\left(\frac{1-\xi}{1+\xi}\right)^{in}e^{ikr\xi}\phi_n\left(\frac{ikr}{2}(1-\xi^2)\right)d\xi. \qquad (5.5.28)$$

ここに

$$\phi_n(x)\equiv\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\frac{x^l}{\Gamma(l+1-in)}$$

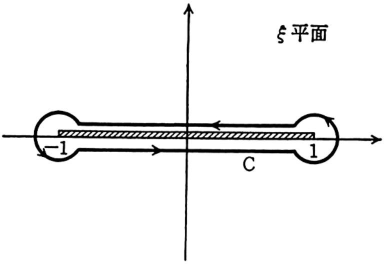


図 5.35 (5.5.28)の積分路

だが，Γ 関数に対する Hankel の積分表示

$$\frac{x^l}{\Gamma(l+1-in)}=\frac{1}{2\pi i}\int_{\mathrm{D}}(x\zeta)^{in}\zeta^{-(l+1)}e^{x\zeta}d\zeta$$

において積分路 D をその上で $|\zeta|>1$ となるように選んでおけば，Legendre 関数の母関数(*5.2.29*)を用いて

$$\phi_n(x)=-\frac{1}{2\pi i}\int_{\mathrm{D}}\frac{1-\zeta^2}{(\zeta^2-2\zeta\cos\theta+1)^{3/2}}(x\zeta)^{in}e^{x\zeta}d\zeta \qquad (5.5.29)$$

と書くことができる(図 5.36 参照).

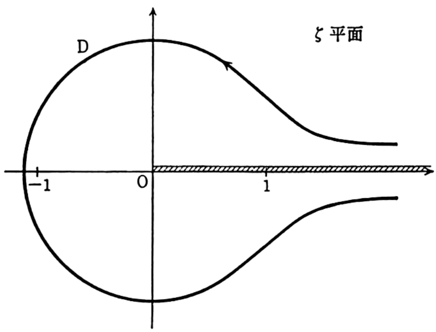


図 5.36　(*5.5.29*)の積分路．Re $x<0$ の場合

ここで，もしも $n=0$ だったら

$$\psi_{n=0}=\frac{1}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\frac{1}{l!}\int_{-1}^{1}e^{ikr\xi}\left[\frac{ikr}{2}(1-\xi^2)\right]^l d\xi$$

となり，(*5.4.28*)と(*5.4.46*)により

$$\psi_{n=0}=e^{ikr\cos\theta} \qquad (5.5.30)$$

となることに注意しておこう．

まず，(*5.5.28*)の積分路 C のうち

$$x\equiv\frac{ikr}{2}(1-\xi^2) \qquad (5.5.31)$$

の虚数部を正にする部分 $\mathrm{C_I}$ を考えよう．これは図 5.35 で切断 [−1, 1] の上岸，下岸にあたる．ξ 積分を $\mathrm{C_I}$ に限ったときの ψ を ψ_{I} と記す．

そうした虚数部が正の x に対して，$kr\to\infty$ における(*5.5.29*)の ζ 積分を峠道の方法で計算することにしよう．峠の位置は

$$\frac{\partial}{\partial\zeta}\left[x\zeta+in\log x\zeta+\log(1-\zeta^2)-\frac{3}{2}\log(\zeta-e^{-i\theta})(\zeta-e^{i\theta})\right]=0$$

から定まり複数個あるが，被積分関数に因子 $e^{x\zeta}$ があって $\mathrm{Im}\,x>0$ であることからみて，積分に寄与が大きいのは $\mathrm{Im}\,\zeta$ が最小の峠であり，それは実質上 $\zeta=e^{-i\theta}$ としてよい．そこで，(5.5.29) の n に関係した部分で $\zeta=e^{-i\theta}$ とおき

$$\phi_n(x)\sim(xe^{-i\theta})^{in}\phi_0(x)$$

とすることができる．もし峠道の方法を遂行していたら

$$\phi_n(x)\sim S(x)\exp[xe^{-i\theta}]$$

という形の結果が得られただろう．ただし，S は x の指数関数を含まないある関数とする．

上の結果を (5.5.28) に代入し，かつ積分を図 5.35 の切断 $[-1,1]$ の上岸に限れば

$$\psi_{\mathrm{I}上}\sim\frac{1}{2}\frac{e^{-n\pi/2}}{1-e^{2n\pi}}\int_{-1}^{1}\left(\frac{1-\xi}{1+\xi}xe^{-i\theta}\right)^{in}e^{ikr\xi}\phi_0(x)\,d\xi$$

が得られる．x は (5.5.31) に定義されている．切断の下岸からの寄与を加えて ψ_{I} とすると $(1-e^{2n\pi})^{-1}$ が消える．あるいは

$$\psi_{\mathrm{I}}\sim\frac{1}{2}e^{-n\pi/2}\int_{-1}^{1}\left(\frac{1-\xi}{1+\xi}\right)^{in}S(x)\exp\left[ikr\left\{\xi+\frac{1}{2}(1-\xi^2)e^{-i\theta}\right\}\right]d\xi.$$

この第2の形で ξ 積分に峠道の方法を適用しよう．$kr\to\infty$ のとき，峠の位置は実質上

$$\frac{\partial}{\partial\xi}\left\{\xi+\frac{1}{2}(1-\xi^2)e^{-i\theta}\right\}=0$$

から定まり，$\xi=e^{i\theta}$．そこで第1の形にもどり n に関わる項で $\xi=e^{i\theta}$ とおけば

$$\psi_{\mathrm{I}}\sim\left(2kr\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^{in}\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}e^{ikr\xi}\phi_0\left(\frac{ikr}{2}(1-\xi^2)\right)d\xi$$

を得る．よって，(5.5.30) から

$$\psi_{\mathrm{I}}\sim e^{i[kz+n\log k(r-z)]}$$

これは (5.5.25) の主要部に一致している．(5.5.25) の第2項までだすには，もうすこし詳しい計算をしなければならない．

次に，図 5.34 の積分路 C のうち $\xi=\pm1$ をかこむ円周からの (5.5.28) への寄与 ψ_{II} の計算であるが，これは ξ 積分をさきにして，あとで l に関する和をとる

ことにすれば前項b)の結果が利用できる．説明は省略しよう．結果は，もちろん(5.5.26)に一致する．

§5.6　磁場における運動†

ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ とスカラー・ポテンシャル $\Phi(\boldsymbol{r},t)$ で記述される電磁場を運動する荷電 e，質量 μ の粒子は，ハミルトニアン

$$H=\frac{1}{2\mu}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\Phi \tag{5.6.1}$$

をもつ．実際，Heisenberg の運動方程式(4.5.1)をつくってみると，時間微分を˙で表し，(5.1.12)のところで定めた添字の約束をもちいて

$$\left.\begin{aligned}\dot{x}_\alpha&=\frac{1}{\mu}\left(p_\alpha-\frac{e}{c}A_\alpha\right)\\ \dot{p}_\alpha&=\frac{e}{2c}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\dot{x}_\beta B_\gamma+B_\gamma\dot{x}_\beta)+\frac{e}{2c}\left(\dot{x}_\beta\frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\beta}+\frac{\partial A_\alpha}{\partial x_\beta}\dot{x}_\beta\right)-e\frac{\partial\Phi}{\partial x_\alpha}\end{aligned}\right\} \tag{5.6.2}$$

となる．$\boldsymbol{B}=\mathrm{curl}\,\boldsymbol{A}$ は磁場である．よって，Newton の運動方程式に相当するものは

$$\mu\ddot{x}_\alpha=\frac{e}{2c}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}(\dot{x}_\beta B_\gamma+B_\gamma\dot{x}_\beta)-e\left(\frac{\partial\Phi}{\partial x_\alpha}+\frac{1}{c}\frac{\partial A_\alpha}{\partial t}\right) \tag{5.6.3}$$

となり，右辺には，たしかに Lorentz 力と電場 $\boldsymbol{E}=-\mathrm{grad}\,\Phi-c^{-1}\partial\boldsymbol{A}/\partial t$ からの力とが現れる．$\partial A_\alpha/\partial t$ は(3.3.8)による $\dot{A}_\alpha$ の計算で $(i\hbar)^{-1}[A_\alpha,H]$ の部分が上の $\dot{p}_\alpha$ の右辺第2項と相殺した残りである．

a)　一様な磁場と軸対称な電場

この節の題は磁場における運動となっているが，はじめは電場も加えて，

$$\boldsymbol{A}=\left(-\frac{B}{2}y,\frac{B}{2}x,0\right),\qquad \Phi=\frac{\mu\varepsilon^2}{2e}(x^2+y^2) \tag{5.6.4}$$

の場合を考える．z 軸方向にむいた一様な静磁場 $\boldsymbol{B}$ があり，それに，xy 面に平行でどの点でも z 軸にむかう向きをもち，強さが z 軸からの距離に比例する軸対称な静電場が重なっている．ハミルトニアン(5.6.1)は

---

† この節の内容は朝永振一郎先生の示唆に負うところが多い．

$$H=\frac{1}{2\mu}(p_x{}^2+p_y{}^2)+\frac{\mu\omega^2}{2}(x^2+y^2)-\frac{\omega_c}{2}(xp_y-yp_x) \qquad (5.6.5)$$

となる．ここに

$$\omega\equiv\sqrt{(\omega_c/2)^2+\varepsilon^2}$$

である．サイクロトロン振動数 $\omega_c\equiv eB/\mu c$ には§5.2でも出会ったことがある．なお，(5.6.5)からは $(2\mu)^{-1}p_z{}^2$ を省いた．z 軸方向の運動は独立だからである．これからずっと $eB>0$ として式を書く．$eB<0$ のときには座標軸の向きを変えればよい．(5.6.5)の最後の項は，電荷 e の粒子が磁場 $\boldsymbol{B}$ のなかで軌道角運動量 $\boldsymbol{L}$ に比例したエネルギー $-(e/2\mu c)\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}$ をもつことを示す．電子の場合 $-e\hbar/2\mu c=5.8\times10^{-9}$ (eV/gauss) である．

(5.6.5)の変数を

$$\left.\begin{aligned}P_1&=(2\mu\hbar\omega)^{-1/2}(p_x+\mu\omega y), & P_2&=(2\mu\hbar\omega)^{-1/2}(p_x-\mu\omega y)\\ Q_1&=-(2\mu\hbar\omega)^{-1/2}(p_y-\mu\omega x), & Q_2&=(2\mu\hbar\omega)^{-1/2}(p_y+\mu\omega x)\end{aligned}\right\} \qquad (5.6.6)$$

にかえると

$$\left.\begin{aligned}&[P_k, Q_l]=-i\delta_{kl},\\ &[P_k, P_l]=[Q_k, Q_l]=0\end{aligned}\right\} \qquad (k, l=1, 2)$$

逆に解けば

$$\left.\begin{aligned}p_x&=(\mu\hbar\omega/2)^{1/2}(P_1+P_2), & p_y&=-(\mu\hbar\omega/2)^{1/2}(Q_1-Q_2)\\ x&=(\hbar/2\mu\omega)^{1/2}(Q_1+Q_2), & y&=(\hbar/2\mu\omega)^{1/2}(P_1-P_2)\end{aligned}\right\} \qquad (5.6.7)$$

この変換で，ハミルトニアン(5.6.5)は

$$H=\sum_{k=1}^{2}\frac{\hbar\omega_k}{2}(P_k{}^2+Q_k{}^2) \qquad (5.6.8)$$

のように調和振動する $k=1,2$ の2つのノーマル・モードのハミルトニアンに分けられる．ただし

$$\left.\begin{matrix}\omega_1\\ \omega_2\end{matrix}\right\}=\sqrt{\left(\frac{\omega_c}{2}\right)^2+\varepsilon^2}\pm\frac{\omega_c}{2}. \qquad (5.6.9)$$

ついでに，角運動量を計算すれば

$$L_z=\frac{\hbar}{2}[(P_2{}^2+Q_2{}^2)-(P_1{}^2+Q_1{}^2)]. \qquad (5.6.10)$$

ハミルトニアン(5.6.8)のひきおこす運動の様相は，Heisenberg 描像

$$Q_k(t) = e^{iHt/\hbar}Q_k e^{-iHt/\hbar} \qquad \text{etc.}$$

で見るとよくわかる．あきらかに

$$Q_k(t) = Q_k \cos\omega_k t + P_k \sin\omega_k t$$
$$P_k(t) = -Q_k \sin\omega_k t + P_k \cos\omega_k t$$

となるから，(5.6.7)により

$$\begin{bmatrix} x(t) \\ y(t) \end{bmatrix} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\begin{bmatrix} \cos\omega_1 t & \sin\omega_1 t \\ -\sin\omega_1 t & \cos\omega_1 t \end{bmatrix}\begin{bmatrix} Q_1 \\ P_1 \end{bmatrix} + \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\begin{bmatrix} \sin\omega_2 t & \cos\omega_2 t \\ -\cos\omega_2 t & \sin\omega_2 t \end{bmatrix}\begin{bmatrix} P_2 \\ Q_2 \end{bmatrix}. \tag{5.6.11}$$

この式の古典的描像をいえば，モード1は時計まわりの円運動を与え，モード2は反時計まわりの円運動を与えているから，粒子の運動 $(x(t), y(t))$ は周転円で表される(図5.37)．それぞれの円の半径は各モードがどれだけ励起されているかによる．

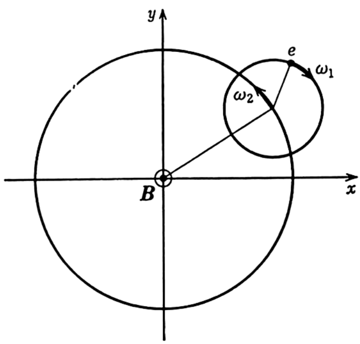


図5.37　電磁ポテンシャル(5.6.4)の中におかれた荷電粒子の運動．粒子の電荷を e とし $eB>0$ としている．

量子力学的には，それぞれのモードが n 重，m 重に励起されている状態 $|n, m\rangle$ は，エネルギー

$$E_{n,m} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_1 + \left(m+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_2 \tag{5.6.12}$$

と角運動量

$$\lambda_{n,m} = (m-n)\hbar \tag{5.6.13}$$

をもち，その波動関数は，ブラ・ケット記号で

$$\langle Q_1, Q_2|n, m\rangle = \left(\frac{1}{\pi 2^{n+m} n!\, m!}\right)^{1/2} H_n(Q_1) H_m(Q_2) e^{-1/2\,(Q_1^2+Q_2^2)} \tag{5.6.14}$$

となる．H_n は Hermite の多項式である．$n, m=0, 1, 2, \cdots$.

この状態は，もとの座標変数でみたら，どう見えるだろう？　(5.6.7)によれば，Q_1, Q_2 を対角にする表示は x, p_y を対角にする表示にほかならない．変換の

ヤコビアンを考慮して

$$\langle x, p_y|n, m\rangle = \hbar^{-1/2}\langle Q_1, Q_2|n, m\rangle$$

運動量表示を座標表示にうつすには変換関数 $\langle y|p_y\rangle = e^{ip_y y/\hbar}/\sqrt{2\pi\hbar}$ をもちいる．Fourier 変換である：

$$\langle \boldsymbol{r}|n, m\rangle \equiv \langle x, y|n, m\rangle = (2\pi)^{-1/2}\hbar^{-1}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ip_y y/\hbar}\langle Q_1, Q_2|n, m\rangle dp_y$$

右辺の積分は Hermite 多項式の母関数をもちいて容易に計算される．いま直交座標の代りに平面極座標 $\boldsymbol{r}=(r, \varphi)$ で書けば

$$\langle \boldsymbol{r}|n, m\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\sum_{\nu=0}^{\min(n,m)} \frac{(-1)^{\nu}(n!m!)^{1/2}}{(n-\nu)!(m-\nu)!\nu!}(\alpha r)^{n+m-2\nu}e^{-(1/2)\alpha^2 r^2}e^{i(m-n)\varphi} \tag{5.6.15}$$

となる．ただし，$\alpha \equiv \sqrt{\mu\omega/\hbar}$．因子 $e^{i(m-n)\varphi}$ は角運動量の固有値(*5.6.13*)に照応している．なお，この式は Laguerre 多項式で書ける：

$$\langle \boldsymbol{r}|n, m\rangle = (-1)^{n_>}\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\left[\frac{n_<!}{(n_>!)^3}\right]^{1/2}(\alpha r)^{|m-n|}e^{-(1/2)\alpha^2 r^2}L_{n_>}^{|m-n|}(\alpha^2 r^2)e^{i(m-n)\varphi}$$

ここに n, m の大きいほうを $n_>$，小さいほうを $n_<$ とした．とくに，$n=0$ のときには簡単になって

$$\langle \boldsymbol{r}|0, m\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{m!\pi}}(\alpha r)^m e^{-(1/2)\alpha^2 r^2}e^{im\varphi}. \tag{5.6.16}$$

さらに $m=0$ とおけば基底状態になる．

(*5.6.15*)は，もちろん，もともとのハミルトニアン(*5.6.5*)の固有値問題を解いて直接に得ることもできる．しかし，そのようにしたとき，上に見た周転円の描像はどこに見出すことができるだろう？

基底状態における波動関数 $\langle x, y|0, 0\rangle$ は，粒子の存在確率密度として原点を中心とする Gauss 分布を与える．その拡りは，r の root-mean-square でいって $\alpha^{-1}=\sqrt{\hbar/\mu\omega}$ である．励起状態については，(*5.6.7*)から得られる

$$\boldsymbol{r}^2 = x^2+y^2 = (\hbar/2\mu\omega)\left[\sum_{k=1}^{2}(P_k{}^2+Q_k{}^2)+2(Q_1Q_2-P_1P_2)\right] \tag{5.6.17}$$

の期待値を(*5.6.14*)をもちいて計算すれば

$$\langle n, m|\boldsymbol{r}^2|n, m\rangle = (\hbar/\mu\omega)(n+m+1) \tag{5.6.18}$$

のように $(n+1/2)$, $(m+1/2)$ にそれぞれ比例する項の和になる．これは周転円軌

道の反映である．

b)　磁場のみの場合．Landau 準位の縮退

前項の諸結果で $\varepsilon\to 0$ にすると，一様な静磁場における荷電粒子の運動が知れる．この極限では，(5.6.9) により $\omega_2=0$ となるので (5.6.11) の周転円はもはや‘周転’しない．モード 2 は運動をやめて単にモード 1 の円運動に静止中心を与えるばかりである．といっても，(5.6.18) はそのまま成り立っているから，その中心位置のゆらぎは相変わらず大きい——これには，しかし，注釈がいるだろう．

それは，$\omega_2=0$ のためエネルギー準位 (5.6.12) は m によらず，無限の縮退

$$E_{n,m}\equiv E_n=(n+1)\hbar\omega_c \qquad (\omega_c\equiv eB/\mu c) \tag{5.6.19}$$

をもつことになるので $(n, m=0, 1, 2, \cdots)$，縮退している状態をうまく重ね合せて円運動の中心のゆらぎを止めることはできないか，という疑問が生ずるからである．この問題は次の項で考えるとしよう．

なお，運動をやめたモード 2 が (5.6.13) の角運動量に相変わらず寄与するのはパラドックスめいているが，磁場のなかでは正準運動量が $\mu\dot{x}_\alpha$ でなく (5.6.2) の p_α なのだから，不思議はない．

エネルギー準位 (5.6.19) を Landau 準位という．いま μ に電子の質量をとり $B=10^4$ (gauss) とすると，サイクロトロン振動数は $\omega_c=1.8\times10^{11}$ (s^{-1}) となり，Landau 準位の間隔は $\hbar\omega_c=1.2\times10^{-4}$ (eV) となる．

Landau 準位の縮退は，粒子を‘箱’に閉じこめれば有限になる．半径 R の円盤状の‘箱’に閉じこめて，そのことを r^2 の 2 乗平均 (5.6.18) が $\leqq R^2$ であると表現してよいものとすれば，準位 E_n の縮退は

$$\nu(n)=(R/a_{\mathrm{L}})^2-E_n/\hbar\omega_c+1 \quad (\text{重}) \tag{5.6.20}$$

となる．ここに

$$a_{\mathrm{L}}=\sqrt{2\hbar/\mu\omega_c}=\sqrt{2c\hbar/eB}$$

は Landau 半径とよばれ，$B=10^4$ (gauss) で 3.6×10^{-6} (cm) という小さな値だから，

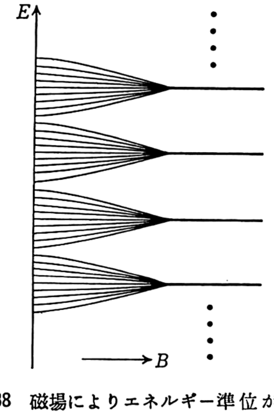


図 5.38　磁場によりエネルギー準位がたばねられる．荷電粒子を閉じこめた箱の大きさが有限であると，Landau 準位へのたばねこみは徐々におこる．

よほど小さい R か，よほど高い準位を問題にしないかぎり

$$\nu(n) = (R/a_{\rm L})^2 = (\mu R^2/2\hbar^2)\cdot\hbar\omega_c$$

としてよい．最右辺の第 1 因子は半径 R の '箱' のなかを動く自由粒子の状態密度であって，この式は "磁場のないとき E_n の上下 $\hbar\omega_c/2$ の間にあった自由粒子の準位が磁場により Landau 準位 E_n に集められる" と読むことができる(図 5. 38).

c) 軌道中心の局所化

磁場は xy 平面上いたるところ一様(並進不変！)だというのに，各 Landau 準位に属する固有関数(5. 6. 15)がどれも座標原点を中心にもち，つまり原点に特別の地位を許しているのは不思議なことだ．(5. 6. 15)の $\langle \boldsymbol{r}|n, m\rangle$ と同等の資格で，中心を $\boldsymbol{r}_0=(x_0, y_0)$ に移した $\langle \boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|n, m\rangle$ も固有関数になって然るべきではないだろうか．

$\langle \boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|n, m\rangle$ は，しかし，(5. 6. 4)のベクトル・ポテンシャルの中心もあわせてずらして移るハミルトニアン

$$H^{\boldsymbol{r}_0} = \frac{1}{2\mu}\left[\left(p_x+\frac{eB}{2c}(y-y_0)\right)^2+\left(p_y-\frac{eB}{2c}(x-x_0)\right)^2\right]$$

の固有関数でこそあれ，もとの $H=H^0$ の固有関数ではない．磁場が並進不変なのに H がそうでないのは奇異に感じられる．

ところで

$$\Gamma_{\boldsymbol{r}_0} \equiv e^{i\alpha^2(y_0x-x_0y)} \qquad (\alpha^2\equiv eB/2\hbar c>0) \qquad (5.6.21)$$

を考えると，$\Gamma_{\boldsymbol{r}_0}{}^*=\Gamma_{\boldsymbol{r}_0}{}^{-1}$ となるので，これはユニタリー演算子であって，運動量にたいして変換

$$\Gamma_{\boldsymbol{r}_0}{}^*p_x\Gamma_{\boldsymbol{r}_0} = p_x+\hbar\alpha^2 y_0, \qquad \Gamma_{\boldsymbol{r}_0}{}^*p_y\Gamma_{\boldsymbol{r}_0} = p_y-\hbar\alpha^2 x_0 \qquad (5.6.22)$$

をひきおこす．座標は変えない．それゆえ

$$\Gamma_{\boldsymbol{r}_0}{}^*H^{\boldsymbol{r}_0}\Gamma_{\boldsymbol{r}_0} = H^0$$

が成り立ち，$H^{\boldsymbol{r}_0}$ の固有関数 $\langle \boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|n, m\rangle$ を手短かに $u_{n,m}^{\boldsymbol{r}_0}$ と書くとき

$$H^0\Gamma_{\boldsymbol{r}_0}{}^*u_{n,m}^{\boldsymbol{r}_0} = \Gamma_{\boldsymbol{r}_0}{}^*H^{\boldsymbol{r}_0}u_{n,m}^{\boldsymbol{r}_0} = E_n\Gamma_{\boldsymbol{r}_0}{}^*u_{n,m}^{\boldsymbol{r}_0}$$

となるので

$$\Gamma_{\boldsymbol{r}_0}{}^*u_{n,m}^{\boldsymbol{r}_0} = e^{-i\alpha^2(y_0x-x_0y)}\langle \boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|n, m\rangle \equiv \langle \boldsymbol{r}|n, m\,;\boldsymbol{r}_0\rangle \qquad (5.6.23)$$

が，もとのハミルトニアン $H=H^0$ の固有関数になっている．こうして (xy) 平面上の任意の点 $\boldsymbol{r}_0=(x_0, y_0)$ に中心をもつ固有関数が得られたので，当然のことな

がら，この項の最初に問題とした座標変換の不思議はなくなった．

上に得た $\langle \boldsymbol{r}|n, m; \boldsymbol{r}_0\rangle$ は，$m=0, 1, 2, \cdots$ かつ任意の $\boldsymbol{r}_0 \in \mathrm{R}^2$($\mathrm{R}^2$ は xy 平面上のすべての点の集合)に対して同一の固有値 E_n に属する H の固有関数である．この(可付番無限)×(連続無限)^{2}個がすべて独立なわけはない．エネルギー固有値 E_n に属する固有空間 H_n でいえば，$\boldsymbol{r}_0=0$ にかぎって m だけ $0, 1, 2, \cdots\cdots$ をはしらせると，これだけで完全系になるのだった．

ここでは $m=0$ にかぎり，$\boldsymbol{r}_0$ も大きさ r_0 は固定して方向 φ_0 だけ 2π をぐるりとはしらせて得る集合

$$\mathrm{V}_{n,r_0} \equiv \{\langle \boldsymbol{r}|n, 0; (r_0, \varphi_0)\rangle:\ 0 \leqq \varphi_0 < 2\pi\}$$

がエネルギー固有値 E_n の部分空間 H_n で完全系をなすことを示そう．一定値 r_0 は任意に小さくてよい．そのために，ここに掲げた固有関数はどれも r^2 の期待値を小さくすることになるはずである．これは前項からの懸案であった．

まず，$n=0$ の部分空間で考えよう．ここでは(5.6.16)を $m=0, 1, 2, \cdots$ と集めた可付番個が完全系をつくっている．したがって，(5.6.16), (5.6.22)より得る

$$\langle r|0, 0; (r_0, \varphi_0)\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-(1/2)\alpha^2 r_0^2} \cdot e^{-(1/2)\alpha^2 r^2} \exp\left[\alpha^2 r_0 r e^{i(\varphi-\varphi_0)}\right]$$

の $0 \leqq \varphi_0 < 2\pi$ にわたる適当な線形結合によって(5.6.16)が再現できることを示せば，V_{0,r_0} の完全性がいえる．それは，たやすい：

$$C_{m,r_0}^{-1} \int_0^{2\pi} d\varphi_0\, e^{im\varphi_0} \langle \boldsymbol{r}|0, 0; (r_0, \varphi_0)\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{m!\pi}} (\alpha r)^m e^{-(1/2)\alpha^2 r^2} e^{im\varphi} = \langle \boldsymbol{r}|0, m\rangle. \tag{5.6.24}$$

ただし，$C_{m,r_0} \equiv 2\pi(\alpha r_0)^m e^{-(1/2)\alpha^2 r_0^2}/\sqrt{m!}$ である．r_0 が任意に小さくてよいことも，この計算から明瞭に読みとれる．

一般に，$n \geqq 1$ の部分空間 H_n における V_{n,r_0} の完全性を証明するには，まず(5.6.15)の $\langle \boldsymbol{r}|n, m\rangle$ が――(5.6.14)にさかのぼって考えたとき――$\langle \boldsymbol{r}|0, m\rangle$ にモード1に関する生成演算子

$$b^* = 2^{-1/2}(Q_1 - iP_1) = (2\mu\hbar\omega_c)^{-1/2}[-i(p_x - ip_y) + \hbar\alpha^2(x - iy)]$$

を n 回くりかえし作用させれば得られることに注意する．同様に，中心を $\boldsymbol{r}_0$ に移した $\langle \boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|n, m\rangle$ は $\langle \boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|0, m\rangle$ に

$$b_{r_0}{}^* = (2\mu\hbar\omega_c)^{-1/2}[-i(p_x - ip_y) + \hbar\alpha^2(x - iy) - \hbar\alpha^2(x_0 - iy_0)]$$

をくりかえし作用させれば得られる．ところが，(5.6.22)と以前の(5.1.8)によれば

$$b_{r_0}^* = \Gamma_{r_0} b^* \Gamma_{r_0}^* = T_{r_0}^* b^* T_{r_0}.$$

したがって

$$b^* \Gamma_{r_0}^* T_{r_0}^* = \Gamma_{r_0}^* T_{r_0}^* b^* \qquad (5.6.25)$$

も成り立つ．

さて，(5.6.24)を(5.6.23)により

$$\langle \boldsymbol{r}|0, m\rangle = C_{m,r_0}^{-1} \int_0^{2\pi} d\varphi_0\, e^{im\varphi_0} \Gamma_{r_0}^* T_{r_0}^* \langle \boldsymbol{r}|0, 0\rangle$$

と書いて，両辺に b^* を掛けてみよう．右辺に掛けるとき(5.6.25)に注意すれば

$$b^* \langle \boldsymbol{r}|0, m\rangle = C_{m,r_0}^{-1} \int_0^{2\pi} d\varphi_0\, e^{im\varphi_0} \Gamma_{r_0}^* T_{r_0}^* b^* \langle \boldsymbol{r}|0, 0\rangle$$

すなわち

$$\langle \boldsymbol{r}|1, m\rangle = C_{m,r_0}^{-1} \int_0^{2\pi} d\varphi_0\, e^{im\varphi_0} \langle \boldsymbol{r}|1, 0\,;\,(r_0, \varphi_0)\rangle. \qquad (5.6.26)$$

以下同様にして b^* を n 回まで掛ければ，任意の m の $\langle \boldsymbol{r}|n, m\rangle$ が V_{n,r_0} の元の線形結合で表せることがわかる．こうして，エネルギー固有値 E_n の部分空間 H_n における V_{n,r_0} の完全性が証明された．

$\mathsf{V}_{r_0} \equiv \{\mathsf{V}_{n,r_0}:\ n=0, 1, 2, \cdots\}$ が全 Hilbert 空間における完全系になることは，もはや，いうまでもない(r_0 はいくら小さくてもよい！)．この完全系は，しかし，直交系ではないから，実は過剰完全系である．

V_{r_0} の各元は，荷電粒子が磁場のなかで座標原点をかこむ半径 r_0 の円周 C の上に中心をもつ円軌道を描いている定常状態を表すものと解釈される．円軌道の中心の C 上での位置 φ_0 と粒子のエネルギー E_n は，それぞれの元ごとに定まっている．各元による r^2 の平均が

$$|N|^{-2} \langle n, 0\,;\,(r_0, \varphi_0)|\boldsymbol{r}^2|\,|n, 0\,;\,(r_0, \varphi_0)\rangle = (n+1)\,a_{\mathrm{L}}^{\,2} + r_0^{\,2}$$

となるのも，むべなるかな．ここに N は規格化因子．エネルギー E_n の円軌道の半径は Landau 半径 a_{L} の $\sqrt{n+1}$ 倍とみてよいのである．この平均を計算するには，(5.6.26)のような式を逆に解いた表式

$$\langle \boldsymbol{r}|n, 0\,;\,(r_0, \varphi_0)\rangle = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\alpha r_0)^m}{\sqrt{m!}} e^{-(1/2)\alpha^2 r^2} e^{-im\varphi_0} \langle \boldsymbol{r}|n, m\rangle \qquad (5.6.27)$$

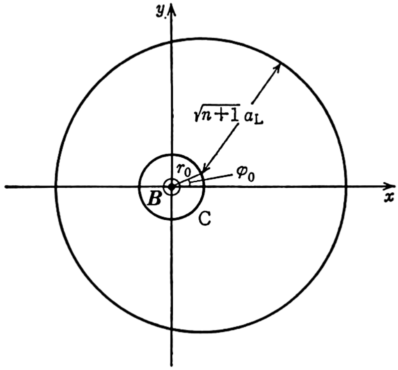


図 5.39 任意に小さい円 C 上に中心をもつ円軌道の全体が完全系をなす

をもちい，(5.6.18)を利用するとよい．

d) ゲージ変換

まえの項で重要な役をした(5.6.21)は，ゲージ変換とよばれるものの例である．

電磁気学では，任意の関数 $\Lambda=\Lambda(\boldsymbol{r},t)$ をとってポテンシャルを

$$\boldsymbol{A}\rightarrow\boldsymbol{A}'\equiv\boldsymbol{A}+\mathrm{grad}\,\Lambda,\qquad \Phi\rightarrow\Phi'\equiv\Phi-c^{-1}\partial\Lambda/\partial t \tag{5.6.28}$$

のように変えることをゲージ変換というのだった．ポテンシャルの与える電場も磁場もこの変換で変わらない．(5.6.1)の形をしたハミルトニアンは

$$H\rightarrow H'=\frac{1}{2\mu}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}-\frac{e}{c}\,\mathrm{grad}\,\Lambda\right)^2+e\left(\Phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\right)$$

に変わるが，ユニタリー変換

$$\Gamma_\Lambda=e^{i(e/\hbar c)\Lambda} \tag{5.6.29}$$

をとれば

$$\Gamma_\Lambda{}^*\left(H'-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\Gamma_\Lambda=H-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

が成り立つ．したがって，$\psi(\boldsymbol{r},t)$ がハミルトニアン H に応ずる Schrödinger 方程式 $H\psi=i\hbar\partial\psi/\partial t$ を満たせば，ゲージ変換したポテンシャルをもつ H' に応ずる Schrödinger 方程式は $\psi'=\Gamma_\Lambda\psi$ が満たす．

量子力学では，電磁ポテンシャルの変換(5.6.28)に波動関数のユニタリー変換(5.6.29)をあわせて**ゲージ変換**という．上の結果は "Schrödinger 方程式は

ゲージ変換で不変”と要約される.

まえの項で考えた(5.6.21)は

$$\Lambda=(B/2)(y_0x-x_0y)$$

の場合であった．いま，勝手な実定数λをとって

$$\Lambda=(\lambda B/2)(x^2+y^2)$$

とし(5.6.4)のポテンシャルをゲージ変換すると

$$\boldsymbol{A}'=\left(\left(-\frac{1}{2}+\lambda\right)By,\left(\frac{1}{2}+\lambda\right)Bx,0\right)$$

となる．とくに$\lambda=1/2$とすればA'のx成分が消え，ハミルトニアンは

$$H'=\frac{1}{2\mu}p_x{}^2+\frac{1}{2\mu}\left(p_y-\frac{e}{c}Bx\right)^2$$

となるのでp_yが運動の定数となる．それを$\hbar k_y$とおけば，H'は

$$\langle\boldsymbol{r}|n,k_y\rangle=u_n(x)e^{ik_yy}$$

の形をした固有関数をもつ．ここにu_nは

$$\left[\frac{1}{2\mu}p_x{}^2+\frac{1}{2\mu}\left(\hbar k_y-\frac{e}{c}Bx\right)^2\right]u_n=E_nu_n$$

という固有値問題の解である．これは力の中心が$x_0=c\hbar k_y/eB$までずれた調和振動子の問題と同じ形だから，容易に解ける．このようにして定めたエネルギー準位がb)項で見出したのと同じ縮退をもつことを，読者は確かめよ.

§5.7　多 粒 子 系

系の粒子数が2個以上に増すと，その量子力学的な扱いには種々の新概念が必要になる．それも粒子数が数個以下の場合と事実上∞とみなせる場合とでちがう．この節では前者をあつかい，後者は第9章でとりあげる.

ここで例とするのは，主としてヘリウム原子である．水素分子にも最後に簡単にふれることにしたい.

a)　配 位 空 間

N個の粒子からなる系の波動関数は，粒子たちの空間座標$\boldsymbol{x}_i=(x_i,y_i,z_i)$とスピン座標$m_{si}\equiv\nu_i$の関数$\psi(\boldsymbol{x}_1,\nu_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N,\nu_N;t)$である$(i=1,2,\cdots,N)$．定常状態だけ考えるときは，$\psi$の代わりに$u$を書く.

波動といっても，これは通常の3次元空間におこる波ではない．量子力学は，複素数値をとる波動関数の必然を知ったとき古典物理の波動概念に訣別したのだったが，こんどの第2の訣別はより決定的にみえる．$(x_1, y_1, z_1, \cdots, x_N, y_N, z_N)$ を直交座標とする空間を**配位空間**とよぶ．スピンを別にして，波動関数は配位空間における波である．

N 個の粒子のうち，もし粒子 i と粒子 j が同種であれば，それらの座標の交換に関して波動関数は反対称でなければならない．**Pauli の原理**である：

$$u(\cdots, \boldsymbol{x}_j, \nu_j, \cdots, \boldsymbol{x}_i, \nu_i, \cdots) = -u(\cdots, \boldsymbol{x}_i, \nu_i, \cdots, \boldsymbol{x}_j, \nu_j, \cdots) \qquad (5.7.1)$$

このため，粒子 i, j が同じ座標値 $\boldsymbol{x}_i=\boldsymbol{x}_j$, $\nu_i=\nu_j$ をとる確率はゼロ．つまり，同種粒子は席を同じくし得ない．

さて，ヘリウム原子は電子2個と原子核の結合系である．電子はスピン1/2と†

質量 $\quad m_e = \quad (9.109534\pm0.000047)\times10^{-28} \quad (\mathrm{g})$

電荷 $\quad -e = -(4.803242\pm0.000014)\times10^{-10} \quad (\mathrm{esu})$

をもつ．ヘリウムの原子核には ^{4}He と ^{3}He があり，スピンは前者が0，後者は1/2で，それぞれ

質量 $\quad M(^4\mathrm{He}) = 6.64604\times10^{-24} \quad (\mathrm{g})$

$\quad M(^3\mathrm{He}) = 5.00791\times10^{-24} \quad (\mathrm{g})$

をもち，電荷はともに $+2e$ である．原子番号でいえば $Z=2$.

原子核の空間座標を特に $\boldsymbol{X}$ として Schrödinger 方程式を書けば

$$(H-E)u_{\mathrm{He}} = 0 \qquad (5.7.2)$$

ここに

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{X}^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{\partial^2}{\partial {\boldsymbol{x}_1}^2} + \frac{\partial^2}{\partial {\boldsymbol{x}_2}^2}\right) - \frac{Z_e{}^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{X}|} - \frac{Z_e{}^2}{|\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{X}|} + \frac{e^2}{|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|} \qquad (5.7.3)$$

いま同種粒子は電子2個だが，方程式(5.7.2)が Pauli の原理

$$u_{\mathrm{He}}(\boldsymbol{x}_2, \nu_2, \boldsymbol{x}_1, \nu_1, \boldsymbol{R}, \nu_N) = -u_{\mathrm{He}}(\boldsymbol{x}_1, \nu_1, \boldsymbol{x}_2, \nu_2, \boldsymbol{R}, \nu_N) \qquad (5.7.4)$$

と両立することは明瞭．つまり，右辺が解なら左辺も解である．一般にハミルトニアンは同種粒子の座標(空間＋スピン)の交換に関して対称だから(そうでないと'同種'といえない)，Schrödinger 方程式は Pauli の原理と両立する．時間に

† 1976年の値．巻末の［Particle Data Group 1976］による．

依存する波動関数 ψ についても，ある時刻に Pauli の原理を満たしていたら，任意の時刻に満たすことが証明できる．試みよ．

b）重心運動の分離

ハミルトニアン(5.7.3)をみると，ポテンシャルの項は電子や核子の位置ベクトルの差だけによっている．原子の重心座標と電子 i の核に対する相対座標を

$$\boldsymbol{R} = (M\boldsymbol{X}+m_e\boldsymbol{x}_1+m_e\boldsymbol{x}_2)/M_{\text{tot}}, \qquad M_{\text{tot}} = M+2m_e$$

$$\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{X} \qquad (i=1,2)$$

によって定義すれば，このポテンシャルは相対座標 $\boldsymbol{r}_i$ だけで表しきれる．他方

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{M}{M_{\text{tot}}}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}}-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_1}-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_2}, \qquad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}_i} = \frac{m_e}{M_{\text{tot}}}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}}+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_i}$$

となるから，これで運動エネルギーの部分を書き直せば

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_{\text{tot}}}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{R}^2}+H_{\text{rel}}+H' \tag{5.7.5}$$

を得る．ここで

$$H_{\text{rel}} \equiv -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}_1{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}_2{}^2}\right)-\frac{Ze^2}{r_1}-\frac{Ze^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}} \tag{5.7.6}$$

$$H' \equiv -\frac{\hbar^2}{M_{\text{tot}}}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}_1 \partial \boldsymbol{r}_2} \tag{5.7.7}$$

が相対座標 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$ しか含まないことが注目される．ここに

$$r_{12} \equiv |\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2| = |\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|$$

は電子のあいだの距離であり

$$\mu \equiv m_e M/(m_e+M)$$

は電子(1個！)と核との換算質量である．こうして(5.7.2)が重心運動を分離した形の解をもつことがわかる．さらに，相対運動にかかわる $H_{\text{rel}}+H'$ がスピン演算子を含まないので，その解を

$$u_{\text{He}} = e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}}w(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\chi(\nu_1, \nu_2)\phi(\nu_N) \tag{5.7.8}$$

の形としてよい．この形の解さえ残らず求めておけば，それらの線形結合として(5.7.2)の任意の解が書けるはずなのである．$e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{R}}$ が $\hbar\boldsymbol{K}$ を運動量にもつ重心運動の波動関数であることは，いうまでもない．相対運動の波動関数 w は，固有値問題

$$(H_{\text{rel}}+H') = E_{\text{rel}}w, \qquad E = \hbar^2K^2/(2M_{\text{tot}})+E_{\text{rel}} \tag{5.7.9}$$

から定める．境界条件は1体問題の場合から類推されよう．

Pauli の原理(*5.7.4*)は(*5.7.8*)の相対運動のなかに集約される：

$$\frac{w(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1)}{w(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)} = -\frac{\chi(\nu_1, \nu_2)}{\chi(\nu_2, \nu_1)}$$

この左辺は空間座標の関数，右辺はスピン座標の関数なので，結局1つの定数になるほかない．それを σ とおけば

$$w(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) = \sigma w(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2), \qquad \chi(\nu_2, \nu_1) = -\sigma\chi(\nu_1, \nu_2).$$

もう1度 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$ を交換して

$$w(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \sigma w(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) = \sigma^2 w(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$$

を得るから $\sigma=\pm1$ でなければならない．よって $w\chi$ は $\sigma=+1$ の $w_{対称}\chi_{反対称}$ か $\sigma=-1$ の $w_{反対称}\chi_{対称}$ の形にかぎられる．

ところが，2つのスピンの合成の固有状態(*5.2.68*), (*5, 2.69*)がちょうどこの種の対称性をもっているので，$w\chi$ として

$$\text{パラ状態:}\quad w_{対称}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\cdot[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]/\sqrt{2}$$

$$\text{オルト状態:}\quad w_{反対称}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\cdot\begin{cases}\alpha(1)\alpha(2)\\ [\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]/\sqrt{2}\\ \beta(1)\beta(2)\end{cases} \tag{5.7.10}$$

を考えておくと都合がよい．ただし ν_1, ν_2 を1, 2と略記した．パラ，オルトは量子力学以前から伝わる呼び名．ヘリウムのスペクトルが1重線の系列と3重線の系列に大別されることが知れていたのだ．いまの眼からは，(*5.7.10*)に見るとおり，合成スピン $S=0, 1$ に当る多重度 $2S+1$ によることで，1重項状態，3重項状態の呼び名を用いることも多い．3重項状態では2つの電子が同じ位置にくることはない，$w_{反対称}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|_{\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{r}_2}=0$，という事実に注意しておこう．

こうして，ヘリウム原子の定常状態 u_{He} の決定は，電子の核に対する相対座標 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$ の対称または反対称な関数で(*5.7.9*)の解となるものを求めることに帰着した．

以下その解法を考えるが，さしあたり，H' を無視したい．(*5.7.7*)に見るとおり H' が核の質量を分母にもち，電子の質量が分母にきている H_{rel} より格段に小さいと考えられるからである．事情は運動量表示に移れば一目瞭然だろう．いま原子の全運動量 $\hbar\boldsymbol{K}$ を一定としているので，核の運動は電子の運動からうける

反跳にほかならず，両者は同じ程度の運動量をもつ．それで，運動エネルギーは質量の格段に大きい核のほうが電子より小さくなるのである．H' を無視する近似では，解くべき方程式は

$$H_{\mathrm{rel}}w = E_{\mathrm{rel}}w \tag{5.7.11}$$

となる．H_{rel} は(5.7.6)に定義されているが，もし電子間 Coulomb ポテンシャル e^2/r_{12} がなかったら，方程式(5.7.11)は変数分離するところだ．しかし，この項がとくに小さいという理由もないので($Z\gg 1$ だったら別だが)，問題はやさしくない．解法の説明からはじめるとしよう．

c) 変分法

一般に，与えられたハミルトニアン H の固有値を $E_0<E_1\leqq\cdots$ とし，対応する固有関数の完全正規直交系を $u_0, u_1, \cdots$ としよう．固有値 E_1 以上は連続でもよし縮退があってもよいが，E_0 だけは離散固有値で縮退なしとする．

この固有関数系によって

$$\varphi = c_0u_0+\sum_{k\neq 0}c_ku_k, \qquad |c_0|^2+\sum_k|c_k|^2=1 \tag{5.7.12}$$

と展開できて(必要に応じて和を積分でおきかえる)，ハミルトニアンが演算できるような任意の関数 φ に対して

$$\begin{aligned}\langle\varphi, H\varphi\rangle &= |c_0|^2E_0+\sum_{k\neq 0}|c_k|^2E_k \\ &= E_0+\sum_{k\neq 0}(E_k-E_0)|c_k|^2\end{aligned} \tag{5.7.13}$$

の計算をすると，$E_k-E_0>0$ だから

$$\langle\varphi, H\varphi\rangle \geqq E_0 \tag{5.7.14}$$

の成り立つことがわかる．

(5.7.12)の展開ができるための条件と(5.7.6)のハミルトニアン H_{rel} が演算できるための条件は，それぞれ

$$\langle\varphi,\varphi\rangle=1, \qquad \left\langle\frac{\partial\varphi}{\partial \boldsymbol{r}_i}, \frac{\partial\varphi}{\partial \boldsymbol{r}_i}\right\rangle<\infty \tag{5.7.15}$$

としてよい．ただし $\langle\varphi, (-\partial^2/\partial\boldsymbol{r}_i{}^2)\varphi\rangle$ を $\langle\partial\varphi/\partial\boldsymbol{r}_i, \partial\varphi/\partial\boldsymbol{r}_i\rangle$ と解釈することにした．

こうして，条件(5.7.15)を満たす任意の ψ による H の期待値は H の最低固有値 E_0 より小さくならない．つまり E_0 の上界を与える．それが E_0 に等しくなるのは，(5.7.12)で $c_k=0$, $\forall k\neq 0$ のとき，すなわち ψ が最低固有値の固有関数に一致したときである．これを**変分原理**という．

もし E_1 も離散固有値で，かつ H が直接 φ に演算できれば

$$\langle (H-E_0)\varphi,\ (H-E_1)\varphi\rangle = \sum_{k\neq 0,1}(E_k-E_0)(E_k-E_1)|c_k|^2 \geqq 0$$

が書けて

$$-(E_1-\langle\varphi, H\varphi\rangle)E_0 \leqq \langle H\varphi, H\varphi\rangle - E_1\langle\varphi, H\varphi\rangle.$$

したがって，(5.7.14)が十分に等号に近く

$$\langle\varphi, H\varphi\rangle < E_1$$

となっていれば

$$E_0 \geqq \langle\varphi, H\varphi\rangle - \frac{\langle H\varphi, H\varphi\rangle - \langle\varphi, H\varphi\rangle^2}{E_1-\langle\varphi, H\varphi\rangle}. \qquad (5.7.16)$$

この右辺を最低固有値に対する **Temple の下界**とよぶ．しかし，E_1 は未知だから何かの推定値で代用するほかない．

(5.7.14)か(5.7.16)で等号を成り立たせる φ をさがせば，それが H の最低固有値の固有関数 u_0 になる．よし等号とまでいかなくても，上界と下界を十分に近くする φ が見つかったら，それは u_0 に十分に近いはずだ．これは固有値問題を微分方程式を扱わずに解く方法になる．φ を**試行関数**とよぶ．

ヘリウム原子の問題(5.7.11)に応用してみよう．試行関数として(5.7.10)の w に当るものを

$$\varphi(r_1, r_2) = v_0(r_1\,;\alpha)v_0(r_2\,;\alpha) \qquad (5.7.17)$$

にとる．ここに

$$v_0(r,\alpha) \equiv [(\alpha Z/a_{\rm B})^3/\pi]^{1/2}e^{-\alpha Zr/a_{\rm B}} \quad (a_{\rm B} \equiv \hbar^2/\mu e^2)$$

は，核が電荷 αZe をもつ水素様原子の基底状態における電子の波動関数で，α を動かして u_0 に近づけようというわけだ．α をいれたのは，ヘリウム原子の一方の電子が他方に対する核の Coulomb 電場を遮蔽する効果を重要とみたからである．きっと最適の α は 1 より小さいところにでるだろう．

このように試行関数の形を定めてかかり，ただパラメーターを動かして最適値をさがすのが **Rayleigh-Ritz の方法**である．パラメーターの数が有限では，それらをいくら調節しても真の固有関数に到達することは望めないだろう．とにかく，そこにできるだけ近づこうというのだ．さいわい，固有値は固有関数の誤差に鈍感である．実際，(5.7.13)をみると固有値におこる誤差 $\langle\varphi, H\varphi\rangle - E_0$ は固有関数の誤差を表す c_k の 2 次のオーダーになっている．これは反面，変分法では

固有関数は定めにくいということでもある.

(5.7.17)の試行関数は $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$ の交換に関して対称だから, (5.7.10)のうちパラ状態しかできない. また回転不変でもあるから, 全角運動量は0である. 実験はこれを裏書きしている. ヘリウム原子の基底状態は ^{1}S である(図 5.40).

さて, $\langle\varphi, H_{\rm rel}\varphi\rangle$ を計算しよう. まず

$$\left\langle v_0, -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2}v_0\right\rangle = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{Z}{a_{\rm B}}\right)^2\alpha^2 = \frac{1}{2}\frac{Z^2e^2}{a_{\rm B}}\alpha^2, \qquad (5.7.18)$$

$$\left\langle v_0, -\frac{Ze^2}{r}v_0\right\rangle = -\frac{Z^2e^2}{a_{\rm B}}\alpha. \qquad (5.7.19)$$

つぎに, e^2/r_{12} の期待値を計算するには, Legendre の多項式の母関数(5.2.29)から得られる展開式

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{\sqrt{r_1{}^2+r_2{}^2-2r_1r_2\cos\theta}} = \frac{1}{r_>}\sum_{l=0}^{\infty}\left(\frac{r_<}{r_>}\right)^l P_l(\cos\theta)$$

を利用するとよい. ただし, $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ の間の角を θ とし, r_1 と r_2 の大きいほうを $r_>$, 小さいほうを $r_<$ と記した. これから

$$\left\langle\varphi, \frac{e^2}{r_{12}}\varphi\right\rangle = \frac{5}{8}\frac{Ze^2}{a_{\rm B}}\alpha$$

が得られる. こうして(5.7.16)なる試行関数に対し

$$\langle\varphi, H_{\rm rel}\,\varphi\rangle = \left(\alpha^2 - \frac{16Z-5}{8Z}\alpha\right)\frac{Z^2e^2}{a_{\rm B}}.$$

これを最小にする α は

$$\alpha_0 = 1-(5/16Z)$$

で, 予想どおり1より小さい. 最小値を計算して, (5.7.13)から

$$E_0^{\rm rel} \leqq -\left(Z-\frac{5}{16}\right)^2\frac{e^2}{a_{\rm B}} \qquad (5.7.20)$$

ヘリウムの $Z=2$ を代入すると

$$\alpha_0 = 0.84, \qquad E_0 \leqq -2.8e^2/a_{\rm B} = -77 \quad ({\rm eV}).$$

実験値は $\mathrm{He}\to\mathrm{He}^+ + e$ とするイオン化エネルギーで表されることが多い. ヘリウム原子の基底状態に対して†

$$I(1^1{\rm S}) = 198310.8\pm0.15 \quad ({\rm cm}^{-1}) \qquad (実験,\ ^4{\rm He}) \qquad (5.7.21)$$

† Herzberg, G.: *Proc. Roy. Soc.*(London), A248, 309(1958).

これを ^{4}He 原子における換算質量 μ に対する Rydberg 定数†

$$R_{\mathrm{He}^4} = (e^2/2a_{\mathrm{B}})/2\pi\hbar c = 109722.267\pm0.012 \quad (\mathrm{cm}^{-1})$$

で割れば，得られる数値をさらに 1/2 倍して e^2/a_{B} 単位のイオン化エネルギー I_0' になる：

$$I(1^1S) = 0.903694\, e^2/a_{\mathrm{B}} \equiv I_0' \cdot e^2/a_{\mathrm{B}}$$

これはイオンのエネルギー $-Z^2e^2/2a_{\mathrm{B}}$ と中性原子の E_0 との差であるから

$$E_0 = -\left(\frac{Z^2}{2}+I_0'\right)\frac{e^2}{a_{\mathrm{B}}} \tag{5.7.22}$$

よって

$$E_0 = -2.903693\, e^2/a_{\mathrm{B}} \qquad (\text{実験},\ {}^4\mathrm{He}) \tag{5.7.23}$$

これは上の計算値にかなり近く，しかも予期した不等式を満たしている．ヘリウム以外の原子に対しても (5.7.21) はよい近似を与える (表 5.6)．

表 5.6　変分法によるイオン化エネルギー

		H^-	He	Li^+	Be^{++}
基底状態	理論値	−0.028	0.848	2.723	5.598
1^1S	実験値	+0.028	0.904	2.780	5.656
	差	0.056	0.056	0.057	0.058
	%	200	6.60	2.09	1.04
第 1 励起状態	理論値		0.167	0.605	
2^3S	実験値		0.175	0.610	
	差		0.008	0.005	
	%		4.79	0.83	

(5.7.20), (5.7.30) を等号と見てだしたイオン化エネルギーを実験値と比べる．単位は e^2/a_{B}．ただし，$a_{\mathrm{B}}=\hbar^2/\mu e^2$ は各原子における電子の換算質量をもちいた値とする．なお，H^- の実験値は実は精度のよい理論値．

つぎにヘリウム原子の励起状態を考えよう．

変分法において，最低固有値の正確な固有関数 u_0 が既知なら条件 (5.7.15) に

$$\langle u_0, \varphi\rangle = 0 \tag{5.7.24}$$

を加えると，(5.7.13) と同様の考察から

† 1955 年の値．[Cohen-Du Mond 1957] による．巻末の参考書リストを参照．

$$\langle\varphi, H\varphi\rangle \geqq E_1 \tag{5.7.25}$$

が得られる．固有値 E_1 が離散的ならば，である．そこで，ヘリウム原子に対して(5.7.10)の w にあたるものを

$$\varphi_\pm(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = [v_0(r_1, \alpha)v_1(r_2, \beta) \pm v_0(r_2, \alpha)v_1(r_1, \beta)]/\sqrt{2} \tag{5.7.26}$$

にとってみる．v_0 は，まえと同様に核電荷 αZe の水素様原子の基底状態における波動関数とするが，v_1 には核電荷を βZe とした第1励起状態 2s の

$$v_1(r, \beta) = \left[\frac{1}{8\pi}\left(\frac{\beta Z}{a_\mathrm{B}}\right)^3\right]^{1/2}\left(1-\frac{\beta Z}{2a_\mathrm{B}}r\right)e^{-\beta Zr/2a_\mathrm{B}} \tag{5.7.27}$$

をとってみよう．

こんどの試行関数は，複号のうち下の符号をとれば電子の空間座標の交換に関して反対称でありスピンの3重状態と組んでオルト・ヘリウムの状態 ^{3}S をつくる．これは，パラ状態である基底状態 u_0 とは自動的に直交して条件(5.7.21)を満たす．

計算の手間は複号を残しても同じだから，

$$\frac{\langle\varphi_\pm, H_\mathrm{rel}\varphi_\pm\rangle}{\langle\varphi_\pm, \varphi_\pm\rangle} = \frac{[\alpha-2(1\pm\eta_1)]\alpha+[\beta-2(1\pm\eta_2)]\beta/4}{1\pm A^2}\frac{Z^2e^2}{2a_\mathrm{B}}+\frac{K\pm J}{1\pm A^2} \tag{5.7.28}$$

をだしておこう．ここに——パラメーター α, β は略して

$$K \equiv e^2\int\frac{[v_0(r_1)v_1(r_2)]^2}{r_{12}}d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2, \qquad J \equiv e^2\int\frac{v_0(r_1)v_1(r_2)v_0(r_2)v_1(r_1)}{r_{12}}d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2$$

はそれぞれ**直接積分**，**交換積分**とよばれ，

$$A \equiv \int v_0(r)v_1(r)\,d^3\boldsymbol{r}$$

は**重なり積分**とよばれる．そして

$$\eta_1 \equiv \frac{(1-\beta)\alpha}{\alpha-\beta}A^2, \qquad \eta_2 \equiv \frac{(1-\alpha)\beta}{\beta-\alpha}A^2.$$

オルト・ヘリウム φ_- の場合に(5.7.25)を最小にする α, β の値は

$$\alpha_0 = 1.01, \qquad \beta_0 = 0.77 \tag{5.7.29}$$

である．α_0 が1より大きくなったのは，外側をまわる2s電子によって1s電子が核のほうに押しつけられるということだろう．(5.7.28)の最小値から

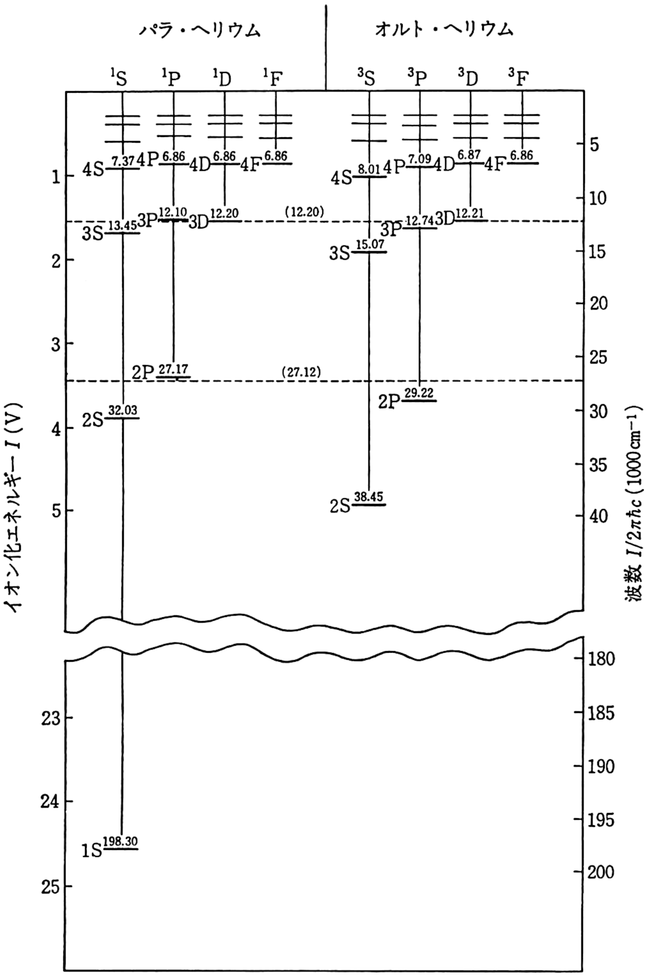


図 5.40 ヘリウム原子のエネルギー準位．イオン化電圧の実験値で示す．それを波数にして各準位の上に記してある．右側はそのスケールである．破線は水素原子のイオン化エネルギーで，$n=2$ と 3 のものだけ描いた．

$$E_1^{\mathrm{rel}} \leqq -2.167e^2/a_{\mathrm{B}} \tag{5.7.30}$$

これを等号とみて(*5.7.22*)によりイオン化エネルギーを求めると，図5.40に示されている $I(2^3\mathrm{S}) = 38.45 \times 10^3\,(\mathrm{cm}^{-1})$ にだいたいあう．Li^+ についてもよい結果が得られる(表5.6)．

α, β がヘリウムに対する(*5.7.29*)の値をとるとき，重なり積分は

$$A^2 = 0.0149$$

であって，1に比べて非常に小さい．(*5.7.28*)でこれを無視すれば

$$\langle \varphi_\pm, H_{\mathrm{rel}}\varphi_\pm \rangle = \left[\alpha(\alpha-2) + \frac{1}{4}\beta(\beta-2)\right]\frac{Z^2e^2}{2a_{\mathrm{B}}} + (K \pm J) \tag{5.7.31}$$

という見やすい式になる．第1項の意味は(*5.7.18*), (*5.7.19*)から推測されよう．第2項が e^2/r_{12} の期待値である．電子の交換に関する波動関数の空間部分の対称性が交換積分のまえの符号に反映している．$\pm J$ を——必要なら $1 \pm A^2$ で割って——**交換エネルギー**という．いま考えている3重項状態でこれが負であるのは，2つの電子が平行なスピンをもっているため Pauli 原理によって互いに近寄れず，それだけ電子間の Coulomb 反撥ポテンシャルがきかないせいである．

試行関数(*5.7.26*)で複号のうち上の符号をとると，電子の座標の交換に関して対称となる．これはパラ・ヘリウムの励起状態 $2^1\mathrm{S}$ を与えるだろうか？　これは対称関数なので，基底状態 u_0 との直交性(*5.7.24*)の保証がない．仮に u_0 を $\alpha = 1 - 5/16Z$ の近似関数(*5.7.17*)で代用し，(*5.7.26*)で $\beta = 1 - 5/16Z$ にとれば直交性の条件は満たせるが，イオン化エネルギーの計算値は実験値 $I(2^1S)$ に比べて小さくなりすぎる．(*5.7.26*)の φ_+ は試行関数として適当でないのだ．別の試みについては巻末の参考書 [Bethe, Salpeter] を見よ．

d) 位置の相関

ヘリウム原子の基底状態にもどろう．さきに用いた試行関数(*5.7.17*)では2つの電子の位置が統計的に独立になっている．それでいいのか？

実際，(*5.7.17*)の与える電子の存在確率密度 $|v_0(\boldsymbol{r}_1, \alpha)|^2 |v_0(\boldsymbol{r}_2, \alpha)|^2$ は個々の電子の存在確率密度の積であって，これが統計的に独立ということの内容だが，2つの電子が互いに他を避けるといった位置の相関はまったくない．

励起状態に対して考えた(*5.7.26*)の試行関数 $\varphi_-(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ には，Pauli の原理に由来する位置の相関があった．基底状態では，2つの電子のスピンが反平行なの

で，Pauli の原理は位置の相関をもたらさないが，電子たちは Coulomb 力で反撥しあうのだから，これが位置の相関として現れないはずはない．Pauli の原理に由来する相関に対して，これは動力学的な相関といえるだろう．これを試行関数 (5.7.17) が反映していないのは不満足である．

(5.7.6) の H_{rel} を

$$\boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2, \qquad \boldsymbol{\xi} = (\boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2)/2 \tag{5.7.32}$$

で書き直してみよう．微分方程式 (5.7.11) は

$$\left(-\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\rho}^2}+\frac{e^2}{\rho}\right)w = \left(\frac{\hbar^2}{4\mu}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\xi}^2}+\frac{Ze^2}{|\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\rho}/2|}+\frac{Ze^2}{|\boldsymbol{\xi}-\boldsymbol{\rho}/2|}+E^{\text{rel}}\right)w. \tag{5.7.33}$$

いま配位空間で $\boldsymbol{\rho}\cong 0$ のあたりが問題である．$\boldsymbol{\xi}\cong 0$ 付近——$\boldsymbol{\rho}\cong 0$, $\boldsymbol{\xi}\cong 0$ は核の近く——を別にすれば，(5.7.33) の右辺の (…) は $\boldsymbol{\rho}$ によらないとみていい:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\rho}^2}+\frac{e^2}{\rho}\right)w = \left(\frac{\hbar^2}{4\mu}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{\xi}^2}+\frac{2Ze^2}{\xi}+E^{\text{rel}}\right)w.$$

これは変数分離している．分離定数を λ としよう．$\boldsymbol{\rho}$ の方向を $\hat{\boldsymbol{\rho}}$ で表して

$$w(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \phi_l(\rho)\, Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{\rho}})\, \omega(\boldsymbol{\xi}) \tag{5.7.34}$$

の形を考えると

$$\left(-\frac{\hbar^2}{\mu}\frac{1}{\rho}\frac{d^2}{d\rho^2}\rho+\frac{e^2}{\rho}+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{\mu\rho^2}-\lambda\right)\phi(\rho) = 0.$$

よくやるように $\phi(\rho)=\rho^s+a_1\rho^{s+1}+\cdots$ とおけば，$s=l$ または $-(l+1)$ にかぎられる．§5.4 a) の議論から後者はとれないので

$$\phi(\rho) = \rho^l\left(1+\frac{1}{2(l+1)}\frac{\rho}{a_{\text{B}}}+\cdots\right) \tag{5.7.35}$$

となる．…の部分は λ に依存し，したがって $\omega(\boldsymbol{\xi})$ によって変わる．それでも，この $\phi(\rho)$ は電子が Coulomb 斥力のせいで互いに他を避けることをはっきり示している．この事実を変分計算の試行関数はとりいれなければいけない．

電子の座標を交換すると $\boldsymbol{\rho}$ の向きが反対になるから，(5.7.34) は

$$w(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) = (-1)^l w(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$$

にかわる．よって，l はパラ状態では偶数，オルト状態では奇数にかぎられる．

ヘリウムの基底状態については，電子の位置の相関を考慮した入念な変分計算が木下東一郎によってなされている．エネルギーについて非常に精度の高い結果を与える点はもちろん，上の (5.7.35) を裏書きしている点でも興味ぶかい．簡単

に説明しよう．

ヘリウムの基底状態は ^{1}S だから全軌道角運動量は 0．これは波動関数の空間部分 $w_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ が空間の回転に関して不変なことを意味している．したがって，w_0 は $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$ からできるスカラー量の関数として表せるはずである．そのスカラー量には $\boldsymbol{r}_1{}^2, \boldsymbol{r}_2{}^2, \boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2$，あるいはこれに同等な組

$$s \equiv (r_1+r_2)/a_B, \qquad t \equiv (-r_1+r_2)/a_B,$$
$$u \equiv |\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|/a_B \qquad (5.7.36)$$

をとれば足りる．図 5.41 の三角形を見れば，これらの変域が

$$|t| \leqq u \leqq s \qquad (5.7.37)$$

に限られることがわかる．

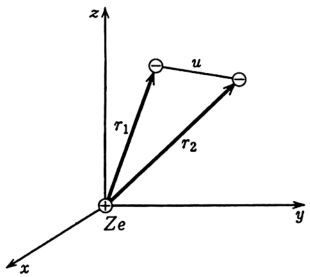


図 5.41　ヘリウム原子．2 電子の位置の相関をみるための変数 u．

木下が用いた試行関数は

$$\varphi(s, t, u) = e^{-ks/2} \sum_{l, m, n \geqq 0} c_{lmn} (ks)^l \left(\frac{u}{s}\right)^m \left(\frac{t}{u}\right)^n \qquad (5.7.38)$$

ただし

$$c_{l0n} = 0 \qquad (n \neq 0) \qquad (5.7.39)$$

という形の 39 項からなる級数．(5.7.39) は条件 (5.7.15) を満たすためである．k と c_{lmn} を変分して (5.7.11) の最低固有値に対し

$$-2.9038737e^2/a_B \leqq E_0{}^{\mathrm{rel}} \leqq -2.9037225e^2/a_B \qquad (5.7.40)$$

が得られた．左辺は最適の φ で計算した Temple の下界 (5.7.16) で，そこの E_1 には実験値 $-2.146e^2/a_B$ を代入した．読者は実験値 (5.7.23) が上の不等式 (5.7.40) の範囲に入らないことに気づいたか．この精度までくると核の運動がきくのだ．最適の φ で (5.7.7) の期待値をつくると（後の (6.1.10) を参照）

$$E_0{}^{核} = 4.78 \quad (\mathrm{cm}^{-1}) = 0.0000218e^2/a_B.$$

さらに相対論的な補正があって，

$$E_0{}^{相対論} \qquad = -0.0001092e^2/a_B$$
$$E_0{}^{相対論}(\mathrm{He}^+) = -0.0001066e^2/a_B \quad (= -2.00(e^2/\hbar c)^2 e^2/a_B)$$

He^+ に対する値を記したのは，イオン化エネルギーを求めるためで，(5.7.22) から

$$I=\left\{-\frac{2e^2}{a_{\rm B}}+E_0{}^{相対論}({\rm He}^+)\right\}-\{E_0{}^{\rm rel}+E_0{}^{核}+E_0{}^{相対論}\}$$
$$=198311.61\quad({\rm cm}^{-1}).$$

実は，これにLambシフトとよばれる量子電磁力学的な効果として $-1.23\,({\rm cm}^{-1})$ を加えねばならない．その結果

$$I=198310.38\quad({\rm cm}^{-1})\qquad(木下,\ 1957)$$

は実験値(*5.7.21*)に美事に一致する！

なお，現在，最も精密といわれている計算値は，別の試行関数でもとめられた

$$I=198310.67\quad({\rm cm}^{-1})\qquad({\rm Pekeris,\ 1958})$$

である．

さて，木下の最適関数 φ における電子相関を示すため，巻末の [Slater] に従って特別の場合を書き下してみよう．電子の存在確率の高いところをねらって $s=1$ とおく．さらに $t=0$ とおくと2つの電子が核から等距離にいることになるが，そういう場合

$$\varphi(1,0,u)=1+0.49799u-0.190868u^2+\cdots-0.000980u^6.$$

つぎに，2つの電子が同一の動径の上にいる場合

$$\varphi(1,u,u)=1+0.501508u+0.059339u^2-\cdots-0.000871u^6.$$

ともに $l=0$ の(*5.7.35*)によくあっている！

e) 水素分子

2電子系のもう1つの典型的な例は水素分子である．水素の原子核2つが距離 R をへだてて静止しているという模型(断熱近似，§6.3を参照)をとれば，電子に対するハミルトニアンは，図5.42に示す記号をもちいて

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m_{\rm e}}\left(\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}_1{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}_2{}^2}\right)-\frac{e^2}{r_{1a}}-\frac{e^2}{r_{1b}}-\frac{e^2}{r_{2a}}-\frac{e^2}{r_{2b}}+\frac{e^2}{r_{12}}+\frac{e^2}{R}\tag{5.7.41}$$

となる．

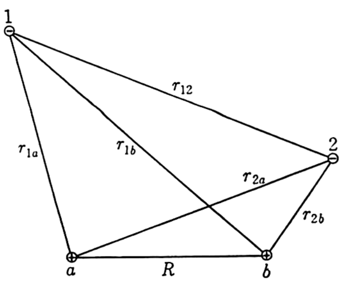


図5.42 水素分子

こんども，H の基底状態を定めるために変分法をもちいてみよう．試行関数と

して(*5.7.10*)の型をとり†, w の代りに

$$\varphi_\pm(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = [v_a(\boldsymbol{r}_1)v_b(\boldsymbol{r}_2) \pm v_a(\boldsymbol{r}_2)v_b(\boldsymbol{r}_1)]/2 \qquad (5.7.42)$$

とおく．$v_a(\boldsymbol{r})$ は核 a を中心とする波動関数で，水素分子に対してこの種の計算をはじめて行った Heitler と London(1927)は，単純に水素原子の基底状態の波動関数

$$v_a(\boldsymbol{r}_k) = (1/\pi a_B{}^3)^{1/2} e^{-r_{ka}/a_B} \qquad (k=1,2) \qquad (5.7.43)$$

をとった．v_b も同様．これらは変分パラメーターを1つも含んでいないが，

$$\frac{\langle\varphi_\pm, H\varphi_\pm\rangle}{\langle\varphi_\pm, \varphi_\pm\rangle} = 2E_0(\mathrm{H}) + \frac{K \pm J}{1 \pm A^2} \qquad (5.7.44)$$

は水素分子のエネルギー $E_0(\mathrm{H}_2)$ の荒い評価にはなるだろう．ここに $E_0(\mathrm{H})$ は水素原子の基底状態のエネルギーであり，

$$K = -2e^2\int\frac{[v_b(\boldsymbol{r}_2)]^2}{r_{2a}}d^3\boldsymbol{r}_2 + e^2\int\frac{[v_a(\boldsymbol{r}_1)v_b(\boldsymbol{r}_2)]^2}{r_{12}}d^3\boldsymbol{r}_1 d^3\boldsymbol{r}_2 + \frac{e^2}{R}$$

$$J = e^2\int v_a(\boldsymbol{r}_1)v_b(\boldsymbol{r}_2)\left(-\frac{1}{r_{2a}} - \frac{1}{r_{1b}} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R}\right)v_a(\boldsymbol{r}_2)v_b(\boldsymbol{r}_1)\,d^3\boldsymbol{r}_1 d^3\boldsymbol{r}_2$$

は，それぞれ直接積分(または Coulomb 積分)，交換積分であって

$$A = \int v_a(\boldsymbol{r})v_b(\boldsymbol{r})\,d^3\boldsymbol{r}$$

は重なり積分である．これらの積分は核間距離 R の関数になるが，R が現実の水素分子の値の付近では J は――K も――負となる．ヘリウム原子の(*5.7.26*)の場合と反対であって，このため電子の座標の交換に関して対称な φ_+ のほうが反対称な φ_- よりエネルギー(*5.7.44*)が低い．それゆえ，基底状態のスピンは1重項状態となる．

(*5.7.44*)から

$$W_\pm(R) = \langle\varphi_\pm, H\varphi_\pm\rangle - 2E_0(\mathrm{H}) = \frac{K \pm J}{1 \pm A^2}$$

をつくれば，これは無限に離れていた2つの水素原子が核間距離 R まで近づくとどれだけエネルギーが高まるかを表す．Heitler-London の計算結果を図5.43にH-Lとして示そう．この $W_+(R)$ は $R=1.7a_B=0.89$(Å) に負の極小値 -3.14(Å)をもつ．こうして1重項状態に水素分子の形成されることが説明されたのである

† ただし，オルト，パラの呼名は水素分子では核のスピンに関してつかう．

量子力学以前にはイオン性でない化学結合の機構はまったくわからなかった. $W_-(R)$ のほうは常に正で極小もない. これは水素分子が3重項状態に励起されると不安定になって解離することを正しく説明している. $W_+(R)$ と $W_-(R)$ のちがいが交換エネルギーによることはいうまでもない.

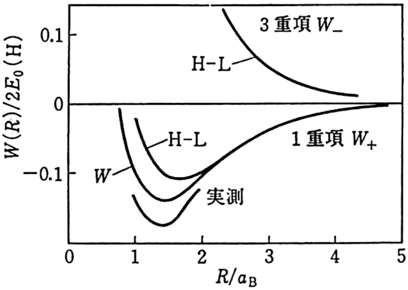


図 5.43 水素分子のエネルギー曲線. 2つの原子核を空間に固定し, 電子系のエネルギー $W_\pm$ を核間距離 R の関数として表したもの. 分子が2つの水素原子に分離したときのエネルギーを基準にしている. これが分子の振動や原子の衝突の際にポテンシャルの役をする(§6.3を参照).

なお, 変分法はエネルギーの上限を与えるのだから, 分子ができるというほうの結論は確実だが, 不安定性のほうは一般には疑問の余地ありとしなければならない.

実測によれば, 水素分子の核間距離は 0.7417(Å), 解離エネルギーは 4.74(eV) だから, Heitler-London 理論は定量的には不満足である. 変分パラメーターを1つも含まない理論なので, これは仕方があるまい.

すぐ考えられる試行関数の改良は, (5.7.43) を

$$v_a(\boldsymbol{r}_k) = (\alpha^3/\pi a_\mathrm{B}{}^3)^{1/2} e^{-\alpha r_{ka}/a_\mathrm{B}} \qquad (5.7.45)$$

にとりかえること. α が変分パラメーターで, その最適値を求めると核間距離 R ごとにちがう. $R\to\infty$ で $\alpha\to 1$ となるのはこの極限で孤立した2つの水素原子ができるのだから当然である. $R\to 0$ では He 原子ができる. そのときの最適値 $\alpha=1.625$ は, まえの項で (5.7.20) をだすときに得た有効核電荷 $2\alpha_0=0.844\times 2$ に大体あっている.

このようにして求めた $W_+(R)$ は, 計算をした Wang(1928) の頭文字をつけて図5.43に示してある.

もっと念の入った変分計算には James と Coolidge(1933) のものがある. 核間距離 0.74(Å), 解離エネルギー 4.73(eV) をだして, 実験との一致を達成している. その試行関数の特徴は, 電子間距離 r_{12} への依存性をいれたところにあり,

実際，変分計算の結果には前に(*5.7.35*)に示した電子相関の様相が現れている．

Heitler-London の試行関数(*5.7.42*)にも電子の位置の相関が入っていないわけではない．それは，電子系の1体波動関数(*5.7.43*)として，電子が別々の原子核に属する形(原子軌道関数)で特に中性原子をなすものだけをとり，2つの電子が一方の原子核に偏って H^- イオンをなす場合を除く結果になっているからである．

もし電子の1体波動関数 $v(\boldsymbol{r}_i)$ に，電子が分子全体のポテンシャルの場を運動する形(分子軌道関数)で特に $v(\boldsymbol{r}_i)=u(r_{ia})+u(r_{ib})$ $(i=1,2$；u は水素原子の波動関数)とする近似をとっていたら，(*5.7.42*)には H^- イオンにあたる $u(r_{1a})u(r_{1b})$ 等の項が含まれただろう．

読者は，巻末の [Slater] などによって電子相関の表現法を深く考察してみるとよい．

一般に，2原子分子のハミルトニアンは(スピンを別にすれば) 2つの原子核を結ぶ直線(ζ 軸)のまわりに電子系を回転しても不変なので，電子系の全角運動量の ζ 成分 L_ζ が良い量子数になる．$L_\zeta/\hbar=0, 1, 2, \cdots$ の状態を $\Sigma, \Pi, \Delta, \cdots$ の名でよぶ．そして，すべての電子の ζ 軸まわりの方位角 φ_i を $-\varphi_i$ に変える変換のパリティを右肩に書き添える．左肩には，電子系の全スピンの大きさ S を多重度 $2S+1$ にして書き添える．

とくに，2つの原子核が同種の分子(等極分子)では，核を結ぶ直線の中点に関する反転のパリティも良い量子数になるから，その $+, -$ を g, u の文字で表して(ドイツ語の gerade, ungerade から) $\Sigma, \Pi, \cdots\cdots$ の右下に書く．水素分子の基底状態は(*5.7.42*)以下から推察されるとおり ${}^1\Sigma_g^+$ であり，酸素分子のそれは ${}^3\Sigma_g^-$ である．

なお，電子の1体波動関数として分子軌道関数をとる場合には，各電子の状態が上と同様にして記述できる．このときには軌道角運動量の ζ 成分を小文字の $\sigma, \pi, \delta, \cdots$ で表す．さきの $v(\boldsymbol{r}_i)=u(r_{ia})\pm u(r_{ib})$ は上の符号なら σ_g，下の符号なら σ_u の状態になる．肩につく量子数はない．

第6章　近　似　法

前章で扱った例のうち，井戸型ポテンシャルの問題や水素原子については比較的簡単な手続きで定常状態の完全系が正確に決定できた．しかし，水素分子，ヘリウム原子の問題では正確な解を書き下すことはできなかった．物理で出会う力学系には一筋縄でいかないもののほうが多い．どうしても近似解法が必要になるのである．

近似法には，物理的考察にとって重要なもう1つの意義がある．すなわち，近似をすることによって，複雑な力学系の一見複雑な挙動のなかから主要な側面をひきだし，主要でない側面は相応な2次的扱いをするということができるようになる．それがかえって微小な効果を浮き出させるということもある．

本章では，力学系のハミルトニアンは与えられているものとして，その力学系の定常状態や時間発展を近似的に決定する方法を考える．

一般には，ハミルトニアンが完全に知れていることは，むしろ稀であって，近似的なハミルトニアンを選ぶことから研究をはじめなければならない場合が多い．つまり，模型の構成である．ハミルトニアンが完全に知れている場合でも，力学系の主要な側面——たとえば主要な運動形態——をとりだすために行う近似は模型の構成とみることができる．模型には適用限界がある．模型の妥当性は，力学系のおかれている状況や問題とする現象によるとみなければならない．

§6.1　定常状態を定める摂動論

摂動論は，与えられた力学系のハミルトニアン H を

$$H = H_0 + H' \qquad (6.1.1)$$

のように，‘解ける’部分 H_0 と，それに比べて‘小さい’H' の和に分けて，問題をいわば H' に関する級数展開の形に解く方法である．H' を摂動(perturbation)と

よび，H_0 を非摂動ハミルトニアンという．H_0 が'解ける'というのは，その固有値問題

$$H_0 v_n = \varepsilon_n v_n \tag{6.1.2}$$

が解けて，固有値 ε_n と固有関数 v_n の完全系が知れていることを意味する．摂動 H' が H_0 に比べて'小さい'という意味は，これらが2つとも演算子なので，c数の大小のように簡単ではない．たとえば，任意の状態ベクトル ψ にたいして

$$|\langle\psi, H'\psi\rangle| \leqq a\langle\psi, \psi\rangle + b\langle\psi, H_0\psi\rangle \tag{6.1.3}$$

が成り立つような'小さい'定数 $a, b \geqq 0$ が存在することとするのが一案であるが，これで H' に関する級数展開が意味をもつことは，もちろん証明を要する．やかましくいえば H_0 も H' もどんな ψ にでも演算できるとは限らないので，いくらか注釈が必要ということもある．この問題には，本講座第4巻『量子力学Ⅱ』第16章で触れる機会があろう．ここでは一般論はさけ，例題によって摂動級数におこる'数学的'現象のいくつかを述べ，物理との関わりを説明したい．

まず，この節では，(6.1.1)の形をしたハミルトニアン H の離散固有値に属する固有状態の近似的決定法を述べよう．詳しくいえば，非摂動ハミルトニアン H_0 の既知の固有状態のうち離散固有値とそれに属する固有ベクトルが，摂動の影響をうけてどう変わるかを調べるのである．摂動 H' によっては，H_0 の離散固有値を連続固有値に変えてしまうような荒々しい影響をもつこともあろう．実際，$V(x)$ を束縛状態をもつようなポテンシャルとし，$H_0 = -(\hbar^2/2\mu)\partial^2/\partial x^2 + V(x)$, $H' = -V(x)$ としてみよ．摂動計算をする際には，こういう可能性も一応考えておかねばならない．

なお，H_0 の連続固有値に属する固有状態に対する摂動の影響を調べるのは，本講座第4巻『量子力学Ⅱ』第Ⅴ部の散乱理論の課題である．

a) 縮退のない状態に対する摂動

非摂動ハミルトニアン H_0 の固有値問題(6.1.2)は解けて，固有関数 v_n の完全正規直交系とそれぞれの固有値 ε_n が知れているものとする．連続固有値も縮退している固有値もあってよいが，ここでは，そのなかで特に離散固有値で縮退のないものひとつに注目し，その固有値 ε_j が摂動 H' をかけたときどれだけずれるか，対応する固有ベクトル v_j がどう変わるかを調べたい．

そのために，問題を少し一般化して，実数パラメーター $0 \leqq \lambda \leqq 1$ をとり，固有

値問題

$$(H_0+\lambda H')u_j = E_j u_j \tag{6.1.4}$$

の解 E_j, u_j で $\lambda\to 0$ のとき ε_j, v_j に収束するものをさがそう．$\lambda=1$ としたときの E_j, u_j が(6.1.1)の求める固有値，固有ベクトルである．固有値のずれは $E_j-\varepsilon_j$ になる．実際には，むしろ λ を残して，これで摂動の‘弱さ’を表すことも多い．

(6.1.4)の解をベキ級数展開の形でさがすのが摂動論である：

$$u_j = v_j+\lambda u_j^{(1)}+\lambda^2 u_j^{(2)}+\cdots \tag{6.1.5}$$

$$E_j = \varepsilon_j+\lambda E_j^{(1)}+\lambda^2 E_j^{(2)}+\cdots \tag{6.1.6}$$

つまり $u_j^{(s)}, E_j^{(s)}$ $(s=1, 2, \cdots)$ を未知として，これらを(6.1.4)が成り立つように定める．しかし，それだけでは答が定まらない．実際，(6.1.4)は u_j に関して線形だから，u_j は複素定数倍だけ不定である．そこで

$$\langle v_j, u_j\rangle = \langle v_j, v_j\rangle = 1 \tag{6.1.7}$$

の条件を付け加えることができる．(6.1.5)でいえば

$$\langle v_j, u_j^{(s)}\rangle = 0 \qquad (s=1, 2, \cdots). \tag{6.1.8}$$

ただし，この条件によって定めた u_j は一般に規格化されていない．

さて，ベキ級数展開(6.1.5), (6.1.6)を固有値方程式(6.1.4)に代入すれば，便宜上 $v_j\equiv u_j^{(0)}$，$\varepsilon_j\equiv E_j^{(0)}$ として

$$(H_0+\lambda H')(u_j^{(0)}+\lambda u_j^{(1)}+\lambda^2 u_j^{(2)}+\cdots)$$
$$= (E_j^{(0)}+\lambda E_j^{(1)}+\lambda^2 E_j^{(2)}+\cdots)(u_j^{(0)}+\lambda u_j^{(1)}+\lambda^2 u_j^{(2)}+\cdots).$$

これが $0\leqq\lambda\leqq 1$ にたいして恒等的に成り立つことを要求するので，両辺を λ のベキで整理したとき，同じベキの項は互いに等しくなければならない：

$$H_0 u_j^{(s)}+H' u_j^{(s-1)} = \sum_{r=0}^{s} E_j^{(r)} u_j^{(s-r)} \qquad (s=1, 2, \cdots). \tag{6.1.9}$$

ただし，$s=0$ の式は(6.1.2)に一致し当然なりたっているので仲間に入れないでおく．

(6.1.9)と v_j の内積をつくろう．H_0 の Hermite 性による $\langle v_j, H_0 u_j^{(s)}\rangle = \langle H_0 v_j, u_j^{(s)}\rangle$ に(6.1.2), (6.1.8)を考慮して

$$E_j^{(s)} = \langle v_j, H' u_j^{(s-1)}\rangle. \tag{6.1.10}$$

この式により，$u_j^{(s-1)}$ が知れれば s の1つ進んだ $E_j^{(s)}$ が求まる．他方，(6.1.9)と v_n $(n\neq j)$ との内積をつくれば，再び H_0 の Hermite 性を利用して

$$(\varepsilon_n-\varepsilon_j)\langle v_n, u_j{}^{(s)}\rangle = -\langle v_n, H'u_j{}^{(s-1)}\rangle+\sum_{r=1}^{s-1} E_j{}^{(r)}\langle v_n, u_j{}^{(s-r)}\rangle \qquad (n\neq j). \tag{6.1.11}$$

右辺にあった $r=0$ の項を左辺に移したので，右辺には $E_j{}^{(1)}, u_j{}^{(1)}$ から $E_j{}^{(s-1)}$, $u_j{}^{(s-1)}$ までしか現れていない．それらが知れると，この式から $\langle v_n, u_j{}^{(s)}\rangle$ が求まるわけである．すると，$\{v_n\}$ は完全正規直交系であったから，(6.1.8) も考慮して

$$u_j{}^{(s)} = \sum_{n\neq j} v_n\langle v_n, u_j{}^{(s)}\rangle$$

のように $u_j{}^{(s)}$ が求まる．すなわち

$$u_j{}^{(s)} = \sum_{n\neq j}\frac{v_n}{\varepsilon_j-\varepsilon_n}\left[\langle v_n, H'u_j{}^{(s-1)}\rangle-\sum_{r=1}^{s-1} E_j{}^{(r)}\langle v_n, u_j{}^{(s-r)}\rangle\right]$$

あるいは，簡潔に

$$u_j{}^{(s)} = \frac{1}{\varepsilon_j-H_0}Q_j\left[H'u_j{}^{(s-1)}-\sum_{r=1}^{s-1} E_j{}^{(r)}u_j{}^{(s-r)}\right]. \tag{6.1.12}$$

ただし

$$Q_j \equiv 1-|v_j\rangle\langle v_j|$$

は v_j に直交する部分空間への射影演算子である．こうして得られた (6.1.10) と (6.1.12) により $E_j{}^{(s)}, u_j{}^{(s)}\ (s=1, 2, \cdots)$ が順々に定まってゆく．

まず，(6.1.10) で $s=1$ とおき

$$E_j{}^{(1)} = \langle v_j, H'v_j\rangle. \tag{6.1.13}$$

(6.1.12) を使う代りに (6.1.11) で $s=1$ とおけば

$$\langle v_n, u_j{}^{(1)}\rangle = \frac{\langle v_n, H'v_j\rangle}{\varepsilon_j-\varepsilon_n} \qquad (n\neq j). \tag{6.1.14}$$

これで $u_j{}^{(1)}$ が定まるから，(6.1.10) にもどって $s=2$ とおき

$$E_j{}^{(2)} = \sum_{n\neq j}\frac{\langle v_j, H'v_n\rangle\langle v_n, H'v_j\rangle}{\varepsilon_j-\varepsilon_n}. \tag{6.1.15}$$

$s=2$ の (6.1.11) からは $n\neq j$ に対して

$$\langle v_n, u_j{}^{(2)}\rangle = \sum_{m\neq j}\frac{\langle v_n, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_j\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_n)(\varepsilon_j-\varepsilon_m)}-\frac{\langle v_j, H'v_j\rangle\langle v_n, H'v_j\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_n)^2}. \tag{6.1.16}$$

が得られ，これで $u_j{}^{(2)}$ が定まる．

そこで (6.1.10) にもどって $s=3$ とおき

$$E_j^{(3)} = \sum_{n\neq j}\sum_{m\neq j}\frac{\langle v_j, H'v_n\rangle\langle v_n, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_j\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_n)(\varepsilon_j-\varepsilon_m)} - \sum_{n\neq j}\frac{\langle v_j, H'v_j\rangle\langle v_j, H'v_n\rangle\langle v_n, H'v_j\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_n)^2}. \qquad (6.1.17)$$

このくりかえしは，いくらでも続けられる．とりわけ電子計算機にはうってつけの方式である．

$\lambda^s E_j^{(s)}$ を s 次の摂動エネルギーとよぶ．それらの表式(*6.1.15*), (*6.1.17*), … で和をとっている状態を**中間状態**とよび，たとえば(*6.1.15*)なら，最初 v_j にいた系が摂動 $\lambda H'$ のせいでいったん中間状態 v_n に移り，再び $\lambda H'$ のせいで v_j にもどるという描像をつかうことが多い．中間状態への遷移はエネルギーを保存しないので，**仮想遷移**とよばれる．摂動のかかっている状態は，上の(*6.1.14*), (*6.1.16*), … を係数とする非摂動状態の重ね合せ

$$u_j = v_j + \sum_{n\neq j} v_n\left\{\lambda\frac{\langle v_n, H'v_j\rangle}{\varepsilon_j-\varepsilon_n} + \lambda^2\left(\sum_{m\neq j}\frac{\langle v_n, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_j\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_n)(\varepsilon_j-\varepsilon_m)} - \frac{\langle v_j, H'v_j\rangle\langle v_n, H'v_j\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_n)^2}\right) + \cdots\right\} \qquad (6.1.18)$$

であるから，たしかに非摂動状態を経めぐるという描像は成り立つが，中間状態のすべてがこのように解釈しきれるわけではない．Feynman は摂動論に別の見地をもちこみ物理的描像と数学的形式を一致させた．

b) 摂動展開の収束，漸近級数

上の公式を**非調和振動子**に適用してみよう．そのハミルトニアンを

$$H = \frac{1}{2\mu}p^2 + \frac{\mu\omega^2}{2}x^2 + \lambda x^4$$

とする．いうまでもなく x が振動子の座標であり，それに共役な運動量が p である．計算を簡単にするため，無次元化した変数 $\bar{p}, \bar{x}$ を

$$\sqrt{1/\mu\hbar\omega}\,p \equiv \bar{p}, \qquad \sqrt{\mu\omega/\hbar}\,x \equiv \bar{x}; \qquad [\bar{p}, \bar{x}] = -i$$

によって導入すれば

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(\bar{H}_0 + \bar{\lambda}\bar{H}') \qquad (6.1.19)$$

となる．ただし

$$\bar{H}_0 \equiv \bar{p}^2 + \bar{x}^2, \qquad \bar{H}' \equiv \bar{x}^4, \qquad \bar{\lambda} \equiv 2\lambda\hbar/\mu^2\omega^3.$$

この $\bar{H}_0$ を非摂動ハミルトニアンにとり，$\bar{H}'$ を摂動とみることにしよう．

以下の計算では煩をさけて $^-$ を省略する．すなわち，$[p, x]=-i$ を満たす変数で書いた

$$H_0 = p^2+x^2, \qquad H' = x^4 \tag{6.1.20}$$

からなる $H=H_0+\lambda H'$ を考える．この H の $\hbar\omega/2$ 倍が上の本当のハミルトニアンである．

H_0 は調和振動子のハミルトニアンだから，摂動論の要求どおり，固有関数も固有値もすっかりわかっている．§3.5の数表示でいえば，生成・消滅演算子を

$$a^\dagger \equiv (x-ip)/\sqrt{2}\,, \qquad a \equiv (x+ip)/\sqrt{2}\,; \qquad [a, a^\dagger] = 1$$

として $H_0=2a^\dagger a+1$ となり，固有関数と固有値は

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle, \qquad \varepsilon_n = 2n+1 \qquad (n=0, 1, 2, \cdots)$$

と書ける．ただし，まえに v_n と書いた固有関数をケット記号で $|n\rangle$ とした．ここで，公式(3.5.14)

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle, \qquad a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$$

を思いだしておこう．

摂動 H' は

$$H' = \left(\frac{a^\dagger+a}{\sqrt{2}}\right)^4 = (a^{\dagger 4}+4a^{\dagger 3}a+6a^{\dagger 2}a^2+4a^\dagger a^3+a^4+6a^{\dagger 2}+6a^2+12a^\dagger a+3)/4 \tag{6.1.21}$$

となる．これを $|n\rangle$ に掛けた結果を求めておくと摂動の計算に便利だろう：

$$\begin{aligned} H'|n\rangle = {} & \frac{1}{4}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}\,|n+4\rangle \\ & +\frac{1}{2}(2n+3)\sqrt{(n+1)(n+2)}\,|n+2\rangle+\frac{3}{4}(2n^2+2n+1)|n\rangle \\ & +\frac{1}{2}(2n-1)\sqrt{n(n-1)}\,|n-2\rangle \\ & +\frac{1}{4}\sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}\,|n-4\rangle. \end{aligned} \tag{6.1.22}$$

さて，摂動論の公式をもちいて非摂動状態 $|j\rangle$ におこるエネルギーのずれを求めてみよう．この状態に縮退はない．(6.1.13)から

$$E_j^{(1)} = \langle j|H'|j\rangle = \frac{3}{4}(2j^2+2j+1).$$

この計算には(6.1.22)で $n=j$ としたものを利用した．次に(6.1.15)から，再び(6.1.22)をもちいて

$$E_j^{(2)} = \sum_{n\neq j}\frac{|\langle n|H'|j\rangle|^2}{2(j-n)} = -\frac{1}{16}(34j^3+51j^2+59j+21).$$

(6.1.17)から $E_j^{(3)}$ を求める計算は複雑だから省略するが，これが

$$E_j^{(3)} = \frac{\langle j|H'|j+4\rangle\langle j+4|H'|j+4\rangle\langle j+4|H'|j\rangle}{(\varepsilon_{j+4}-\varepsilon_j)^2}+\cdots$$

$$= \frac{(j+4)\,!}{4^2 j\,!\,(\varepsilon_{j+4}-\varepsilon_j)^2}\cdot\frac{3}{4}[2(j+4)^2+2(j+4)+1]+\cdots$$

に示すような項を代表とする多数の項の和になることに注意しよう．$(\varepsilon_{j+4}-\varepsilon_j)^2=2^2\cdot 4^2$ である．一般に $s=2r+1$ 次の項では

$$E_j^{(2r+1)} = \frac{(j+4r)\,!}{4^{2r}j!2^{6r}(r\,!)^2}\cdot\frac{3}{4}[2(j+4r)^2+2(j+4r)+1]+\cdots$$

のような項の多数の和になり，その値は $s=2r+1$ とともに急激に増大するだろう．偶数次の $E_j^{(2r)}$ も同様だろう．これが本当なら，摂動級数(6.1.6)は λ がどんなに小さくても発散するほかない．

その様子を見るため，とくに $j=0$ として $E_0^{(s)}$ を上記のくりかえし法により電子計算機で計算した†．結果は表6.1のとおりである．

この表から，たしかに基底状態のエネルギー E_0 の摂動展開の係数 $E_0^{(s)}$ が，絶対値において次数 s とともに急激に増大することがわかる．s が1増すごとに $E_0^{(s)}$ の正負が交代している事実は，後に重要な意味をもつであろう．

E_0 を与えるはずの級数(6.1.6)は発散する．しかし，この級数が，まったく無意味なわけではない．それを N 次で切った

$$E_0^{[N]} \equiv \sum_{s=0}^{N}\lambda^s E_0^{(s)} \qquad (6.1.23)$$

を，別に固有値方程式

$$(p^2+x^2+\lambda x^4)u_0(x) = E_0 u_0(x), \qquad p\equiv -id/dx$$

の数値積分などで求めた‘真の’ E_0 の値と比べてみよう．

† 斎藤慎氏による．

表 6.1　非調和振動子の基底状態のエネルギー摂動計算

s	$E_0{}^{(s)} = A\times 10^B$		$E_0 = \sum_{r=0}^{s} \lambda^r E_0{}^{(r)}$
	A	B	$\lambda = 0.1$
0			1.
1	0.75	0	1.075
2	−0.131 250	1	1.061 875
3	0.520 312 5	1	1.067 078 125
4	−0.301 611 328 125	2	1.064 062 011 718
5	0.223 811 279 297	3	1.066 300 124 512
6	−0.199 946 292 114	4	1.064 300 661 591
7	0.207 770 894 852	5	1.066 378 370 539
8	−0.245 689 177 287	6	1.063 921 478 767
9	0.325 602 188 775	7	1.067 177 500 654
10	−0.478 104 310 601	8	1.062 396 457 548
⋮	⋮	⋮	⋮
15	0.116 016 674 658	15	1.145 532 250 948
16	−0.271 975 761 525	16	0.873 556 489 424
17	0.677 879 469 298	17	1.551 435 958 721
18	−0.179 021 019 502	19	−0.238 774 236 294
19	0.499 401 192 112	20	4.755 237 684 825
20	−0.146 751 401 020	22	−9.919 902 417 219
21	0.453 113 629 668	23	35.391 460 549 630
22	−0.146 665 237 004	25	−111.273 776 454 102
23	0.496 628 306 946	26	385.354 530 492 165
			真の値 1.065 285 509 544

表 6.1 を見よ．これは $\lambda=0.1$ の場合であるが，摂動の N 次近似 $E_0{}^{[N]}$ は $N=4$ のとき真の値に最も近い．誤差 0.09% まで近づいている．摂動論で補正をしない $E_0{}^{[0]}=1$ は 6% もの誤差をもっていたのだから，補正にはたしかに意味がある！ただ，むやみに高次まで近似を進めてはいけないようだ．

もっと大きい $\lambda=0.2$ でも $E_0{}^{[N]}$ は $N=4$ で‘真の’値 $E_0=1.118\,292\,654\,36$ に最も近くなるが，誤差は 1.9% もある．λ を小さくして，$\lambda=0.001$ にすると，$E_0{}^{[N]}$ は $N=5$ で‘真の’値 $E_0=1.000\,748\,692\,67$ に一致し，$N=41$ まで近似を進めてもこの桁数の範囲では遂に動かなかった．もちろん，さらに次数を上げていけば，いずれ級数は‘発散をはじめる’であろう．

この場合のエネルギーの摂動級数(*6.1.6*)は，数学で**漸近級数**とよばれる種類のものである．一般に(*6.1.6*)のような表式があって，それ自身は発散級数だが，

$\lambda\downarrow 0$ では真の値 $E_0(\lambda)$ と N 次部分和 $E_0^{[N]}(\lambda)$ との差が

$$E_0(\lambda)-E_0^{[N]}(\lambda)=o(\lambda^N)\qquad (N=1,2,\cdots,M)$$

となるとき，その表式を M 次の漸近級数または $E_0(\lambda)$ の漸近展開とよぶのである．ただし，右辺の $o(\lambda^N)$ は λ^N で割って $\lambda\downarrow 0$ にしても 0 にゆく量を表す．実用上は，だから，λ が小さければある部分和が真の値に近い値をあたえるような発散級数と考えてよい．

非調和振動子 (*6.1.20*) では $M=\infty$ である．この場合，摂動級数 (*6.1.6*) の発散は，実は予期し得ることであった．というのは，もし (*6.1.6*) がある $\lambda=\lambda_0>0$ で収束したとすると，これはベキ級数だから，$|\lambda|\leqq\lambda_0$ なる範囲の複素数 λ において一様収束して λ の解析関数を定義するはずであるが，他方 $H=H_0+\lambda H_1$ が $\lambda<0$ で離散固有値をもたないことはポテンシャル項 $x^2+\lambda x^4$ の形から予想される．

摂動展開 (*6.1.6*) が漸近級数でしかない場合，これを知って真の値 $E_j(\lambda)$ の近似値を求めるのに，ときに **Padé 近似**が役に立つ ([Baker])．(*6.1.6*) に対し

$$(E_j^{(0)}+\lambda E_j^{(1)}+\lambda^2 E_j^{(2)}+\cdots)Q_N(\lambda)-P_M(\lambda)=O(\lambda^{N+M+1})$$

となるように λ の M 次，N 次の多項式 P_M, Q_N を定め

$$E_j^{[N,M]}(\lambda)\equiv P_M(\lambda)/Q_N(\lambda)$$

とおいて $E_j(\lambda)$ に対する $[N,M]$-Padé 近似とよぶ．非調和振動子 (*6.1.20*) ではこの $[N,N\pm J]$-Padé 近似 ($J=0,1,2,\cdots$) が $N\to\infty$ で真の $E_j(\lambda)$ に単調に収束することが証明されている ([Simon])．証明の要件の 1 つが，さきに表 6.1 のところで注意した‘符号の交代’である．収束の状況を再び基底状態のエネルギーに

表 6.2 非調和振動子の基底状態のエネルギー．
$[N,N]$-Padé 近似 (斎藤慎氏の計算)

N	$\lambda=0.1$	$\lambda=0.2$	$\lambda=1$	$\lambda=10$
0	1.	1.	1.	1.
1	1.063 829 787 234	1.111 111 111 111	1.272 727 272 727	1.405 405 405 405
2	1.065 217 852 491	1.117 540 578 276	1.348 289 096 708	1.647 997 235 311
5	1.065 285 455 329	1.118 288 405 207	1.388 075 603 390	2.024 376 176 003
10	1.065 285 509 535	1.118 292 646 574	1.392 102 495 142	2.262 066 864 483
15	1.065 285 509 544	1.118 292 654 314	1.392 325 237 409	2.353 761 618 494
19	1.065 285 509 544	1.118 292 654 364	1.392 342 893 100	2.379 900 476 274
20	1.065 285 509 544	1.118 292 654 365	1.392 343 886 385	2.405 475 148 908

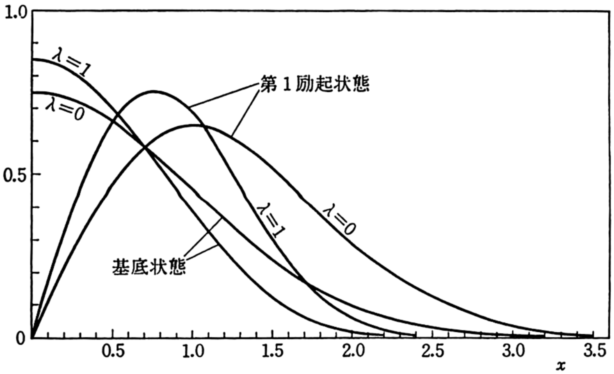


図6.1　$H=p^2+x^2+\lambda x^4$ の固有関数．規格化してある．$\lambda>0$ だから摂動 $H'=x^4$ は波動関数を原点の方に押しつけるが，その効果は第1励起状態において，より大きい．これは非摂動波動関数が摂動の大きい領域までよけいに拡がっているためである．

ついて見よう(表6.2参照)．$\lambda=10$ に対しても収束が得られるのは驚きである．

Padé 近似は，固有関数に対しても有効であるが，固有値を Padé で求め，それをもちいて固有関数は微分方程式を解いて求めるのが簡単である．

つぎに **Stark 効果**を考えよう．

Stark 効果とは，原子に外から一様な静電場 $\boldsymbol{F}$ をかけると原子のエネルギー準位がずれ，そのために原子のだす光の振動数がずれること．摂動論の好題材として教科書によく登場するが，この場合にはすぐ後に説明するとおり，摂動をいれるとハミルトニアンに離散固有値がなくなってしまう．摂動級数(*6.1.6*)ないし(*6.1.23*)がそもそも何を近似するのかが問題になる例である．

簡単のために水素原子の場合でいうと，ハミルトニアン $H=H_0+\lambda H'$ は§5.5の記号で

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta-\frac{e^2}{r},\qquad \lambda H'=eFz \tag{6.1.24}$$

となる．ただし，外場 $\boldsymbol{F}$ の方向を z 軸とした．$\lambda H'$ を λ と H' に分けるためには，Bohr 半径 a_{B} と H_0 に特徴的なエネルギー e^2/a_{B} をもちいて無次元化をして $\lambda H'/(e^2/a_{\mathrm{B}})$ を $\lambda(z/a_{\mathrm{B}})$ とするのがよかろう．そうすると

$$H'=(e^2/a_{\mathrm{B}})\cdot(z/a_{\mathrm{B}}),\qquad \lambda\equiv F/(e/a_{\mathrm{B}}{}^2).$$

λ は，外場 $\boldsymbol{F}$ と Bohr 軌道の位置に原子核がつくる電場 $e/a_{\mathrm{B}}{}^2=5.14\times10^9\,(\mathrm{V/cm})$

との比になっている．仮に $F=10^6$(V/cm) とすれば，$\lambda=1.94\times10^{-4}$.

(6.1.24) の H_0 は水素原子のハミルトニアンだから離散固有値をもつ．それが摂動 $\lambda H'$ を加えると消失してしまうことは，ポテンシャル項 $-e^2/r+eFz$ を見ればわかる (図 6.2)．外場 $\boldsymbol{F}$ のせいで，それまで原子核に束縛されていた電子はトンネル効果により無限遠に逃げるから，電子のエネルギーは，もはや離散的ではあり得ず，連続スペクトルを示すようになるはずである．ところが，摂動論の公式によると，有限次の $E_n^{[N]}$ はいくらか値のずれた離散値を与える．そして，それらの差として算出した光のエネルギーは，外場 $\boldsymbol{F}$ の効果を正しく反映しており，よく実験にあうことが知られている．

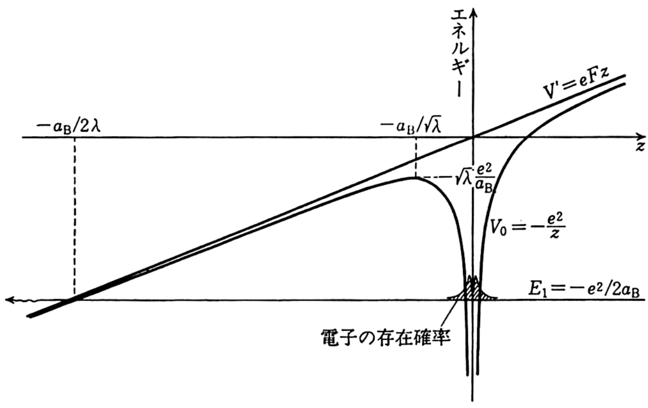


図 6.2　Stark 効果にともなうトンネル効果．$\lambda\equiv F/(e/a_B^2)$ は外場と電子が原子核からうける電場の比である．

この矛盾を摂動の数学理論 ([Kato], Chap. VIII, §5) は**スペクトル濃度の集中**という概念で解決する．すなわち，原子に外から電場を加えると，電子のエネルギーはたしかに連続スペクトルに変わるが，しかし，そのときの状態密度は離散値 $E_j(\lambda)$ のところに鋭く集中すること，そして，摂動級数 $\sum\lambda^s E_j^{(s)}$ は，その $E_j(\lambda)$ の漸近展開を与えること，が証明されるのである．

物理的にいえば，トンネル効果のために電子の束縛状態は有限の寿命 τ でこわれるから，そのエネルギーは $\hbar/\tau$ 程度の不確定をまぬがれない．これが上にいった状態密度のピークの幅にあたる．$\hbar/\tau$ を評価してみよう．

図 6.2 より，電子がトンネルすべき壁は厚さ $a_B/2\lambda$，高さ $e^2/2a_B$ といったもの

なので，電子が壁に衝突したときトンネルする確率 P は WKB 近似の考えからだいたい

$$P \sim \exp\left[-\hbar^{-1}\sqrt{2\mu(e^2/2a_B)}\cdot(a_B/2\lambda)\right] = \exp\left[-1/2\lambda\right]$$

と見積もられる．壁が三角形であること，電子が z 軸方向にトンネルするとは限らないことを考慮すれば，指数関数の肩は絶対値において少し小さめになるだろう．他方，束縛された電子の速さ $v \sim \sqrt{e^2/\mu a_B}$ からみて，電子が壁に衝突する頻度は単位時間あたりだいたい $v/a_B \sim (e^2/a_B)/\hbar$ の程度だろう．これに P をかければ単位時間あたりのトンネル回数 $1/\tau$ になるから

$$\hbar/\tau = (e^2/a_B)e^{-1/2\lambda}. \tag{6.1.25}$$

さきに考えた $F=10^6$ (V/cm) に対して，$e^{-1/2\lambda} \sim 10^{-1000}$ という小ささである！

では，状態密度のピークの位置 $E_j(\lambda)$ は非摂動固有値 ε_j からどのくらいずれるのだろう？　ずれはピークの幅より大きいだろうか？　$E_j(\lambda)$ の漸近展開を与えるはずの (6.1.6) により，水素原子の基底状態について計算してみよう．§5.5 で見たとおり，非摂動ハミルトニアン (6.1.24) の固有状態は $j=(\nu, l, m)$ なる量子数の 3 つ組でラベルされるから，これを $|\nu, l, m\rangle$ と記そう．離散スペクトルに属する状態 (5.5.14) では $\nu=n$，連続スペクトルの状態 (5.5.16) では $\nu=k$．基底状態は $|1,0,0\rangle$ である．

(6.1.24) の摂動項は $H'=(e^2/a_B)\cdot(r/a_B)\cos\theta$．これに対して，$Y_{lm}$ の規格直交性と (5.2.26) から

$$\langle\nu', l', m'|H'|\nu, l, m\rangle \neq 0 \quad \Longrightarrow \quad |l'-l| = 1 \text{ かつ } m' = m \tag{6.1.26}$$

このように，2 つの状態が摂動の行列要素で結ばれるために量子数が満たすべき必要条件を**選択規則**とよぶ．これに照らして，1 次の摂動エネルギー (6.1.13) は消えることがわかる：

$$E_{100}^{(1)} = \langle 1,0,0|H'|1,0,0\rangle = 0.$$

2 次の摂動エネルギー (6.1.15) の計算は，このばあい中間状態の数が多いので容易ではない．上記の選択規則によれば，中間状態はたしかに $(l,m)=(1,0)$ にかぎられ，(5.2.26) から

$$\langle\nu,1,0|H'|1,0,0\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}I_\nu\cdot\frac{e^2}{a_B} \tag{6.1.27}$$

となる．ただし，(5.5.14)，(5.5.16)の動径関数をともに $R_{\nu l}$ と書いて

$$I_\nu \equiv \int_0^\infty R_{\nu 1}(r)\frac{r}{a_B}R_{10}(r)r^2dr$$

だから，これを離散スペクトルに属する $\nu=n$ に対して(5.5.13)を利用して計算してみると

$$I_n = \sqrt{\frac{2^8n^7(n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}}} \qquad (6.1.28)$$

となるので，すべての $n=2, 3, \cdots$ の状態が中間状態として(6.1.15)に寄与する．これに連続スペクトル $\nu=k$, $\varepsilon_k=\hbar^2k^2/2\mu\equiv(e^2/2a_B)\bar{\varepsilon}_k$ からの寄与が加わって

$$E_{100}{}^{(2)} = -\frac{2e^2}{3a_B}\left[\sum_{n=2}^{\infty}\frac{|I_n|^2}{1-1/n^2}+\sum_k\frac{|I_k|^2}{1+\bar{\varepsilon}_k}\right]. \qquad (6.1.29)$$

表6.3に離散スペクトルに対する $I_n{}^2$ の数値を示す．これと，**総和則**

$$\sum_\nu |I_\nu|^2 = (3/a_B{}^2)\sum_{\nu,l,m}|\langle\nu, l, m|z|1, 0, 0\rangle|^2$$
$$= (3/a_B{}^2)\langle 1, 0, 0|z^2|1, 0, 0\rangle = 3$$

とから連続スペクトルの寄与について和 $\sum_k |I_k|^2=0.850$ が知れる．$\bar{\varepsilon}_k\geqq 0$ なので，(6.1.29)から粗い見積りとして

表6.3 $\left(\int_0^\infty R_{nl}(r)(r/a_B)R_{n'l'}(r)r^2dr\right)^2$ の値．
最後の行の'合計'を表5.5の $\langle r^2\rangle$ と比べてみよ．

(n', l')	1s	2s	2p	
(n, l)	np	np	ns	nd
$n=1$	—	—	1.67	—
2	1.665	27.00	27.00	—
3	0.267	9.18	0.88	22.52
4	0.093	1.64	0.15	2.92
5	0.044	0.60	0.052	0.95
6	0.024	0.29	0.025	0.41
7	0.015	0.17	0.014	0.24
8	0.010	0.10	0.009	0.15
$n=9\sim\infty$ の総和	0.032	0.31	0.025	0.42
漸近公式	$4.7n^{-3}$	$44.0n^{-3}$	$3.7n^{-3}$	$58.6n^{-3}$
離散スペクトルの総和	2.150	39.30	29.820	27.62
連続スペクトルの総和	0.850	2.70	0.180	2.38
合計	3.000	42.00	30.00	30.00

[Bethe], p. 350 の表の一部.

$$-(2e^2/3a_{\mathrm{B}})\left[D+\sum_k |I_k|^2\right] < E_{100}{}^{(2)} < -(2e^2/3a_{\mathrm{B}})D$$

ここに

$$D \equiv \sum_{n=2}^{\infty} |I_n|^2/(1-n^{-2}) = 2.740.$$

よって

$$-2.39(e^2/a_{\mathrm{B}}) < E_{100}{}^{(2)} < -1.83(e^2/a_{\mathrm{B}}).$$

おそらく，(*6. 1. 29*)の $\sum_k |I_k|^2/(1+\bar{\varepsilon}_k)$ には基底状態に束縛された電子の運動エネルギーに相当する k のあたりから寄与が大きいだろう．そう考えて，これを $\sum_k |I_k|^2/(1+\langle\bar{\varepsilon}\rangle)$，$\langle\bar{\varepsilon}\rangle \sim 1$ とすれば $E_{100}{}^{(2)} \sim -2.11(e^2/a_{\mathrm{B}})$.

$E_{100}{}^{(2)}$ の値は，別の計算法から([梅沢]，p. 253)正確に求められ

$$E_{100}{}^{(2)} = -2.25(e^2/a_{\mathrm{B}}).$$

この値をとれば，λ^2 までの近似で

$$E_{100}(\lambda) - \varepsilon_{100} = -2.25\lambda^2(e^2/a_{\mathrm{B}}) = -2.25a_{\mathrm{B}}{}^3F^2. \qquad (6.1.30)$$

ついでながら，電場 F が起こしたこのエネルギー変化は，基底状態における水素原子の**分極率** α をもちいて $\alpha F^2/2$ と表されるべきものである．よって $\alpha = 4.5a_{\mathrm{B}}{}^3$.

実際，摂動をうけた基底状態の波動関数 u_{100} を(*6. 1. 5*)によって求め，双極子能率を計算すれば

$$-e\langle u_{100}, zu_{100}\rangle = \alpha F$$

となる．この近似では，u_{100} は規格化されているものとみなしてよく，左辺を $\langle u_{100}, u_{100}\rangle$ で割る必要はない．

こうして，電場による水素原子の基底状態のエネルギーのずれ(*6. 1. 30*)は，その幅(*6. 1. 25*)より圧倒的に大きいことがわかった．$F=10^6$ (V/cm) の電場で $\lambda = 1.94\times10^{-4}$ だったからである．

Stark 効果のハミルトニアンは，正確に扱えば連続スペクトルしかもたない．しかし，そのスペクトルは状態密度の集中のため離散的であるかのように現象するのだ．そうした本質を簡単な計算でとらえるのだから，この場合，摂動論は本章のはじめに述べた近似法のモラルに適っているといわなければならない．

一般にエネルギー固有値および固有関数に対する摂動級数は，おおまかにいって，条件(*6. 1. 3*)のもとでは有限の収束半径をもつ．このような摂動は**正則摂動**

とよばれる．しかし，現実には摂動級数は発散する場合が多い．それでも，係数 $E_j^{(s)}, u_j^{(s)}$ が発散積分になったりしないで確定する次数までの漸近級数にはなるものである．詳しくは [Kato] を見よ．

読者は，次の場合に $H=H_0+\lambda H'$ の固有値，固有関数をひとまず正確に求めて，それらが λ のベキに展開できるか否かを調べ，もし展開できるならそれが摂動級数になるから，その性質を調べてみるとよい：

(i) $H_0 = -d^2/dx^2+x^2, \quad H' = x$

(ii) $H_0 = -d^2/dx^2+x^2, \quad H' = x^2$

(iii) $H_0 = -d^2/dx^2, \quad H' = x^2$

(iv) $H_0 = -\Delta, \quad H' = 1/r.$

ここに $-\infty<x<\infty$，また (iv) は 3 次元の問題，Δ はラプラシアンで，r は原点からの距離である．(iii) と (iv) については，x, r を有限範囲 $[0, L]$ に限って H_0 の固有関数を求め，実際に摂動計算をしてみるのもおもしろかろう．その結果で $L\to\infty$ としたら，どうなるか？

c) 縮退した状態に対する摂動

摂動論は，なにか 1 つの非摂動状態に注目して，それが摂動 H' をかけたときにどう変わるかを問題にするのであった．その状態の属するエネルギー準位に縮退があると，しかし，a) 項の計算はだめになる．準位 ε_j に縮退があるというのは，これに 2 つ以上の 1 次独立な状態 $v_{j\alpha}$ $(\alpha=1, 2, \cdots, A)$ が属することであって $(H_0 v_{j\alpha}=\varepsilon_j v_{j\alpha}$；$A=$縮退度)，(*6. 1. 14*) にせよ (*6. 1. 15*) にせよ分母が 0 になるところがでてくるからである．以後 $\{v_{j\alpha}\}_{\alpha=1,\cdots,A}$ は正規直交化してあるものとする．

摂動公式の分母が 0 になるということだが，たとえば (*6. 1. 14*), (*6. 1. 15*) なら，注目する準位 ε_j に縮退しているどの状態の間でも摂動 H' の非対角行列要素が 0 という場合は別であって，問題を起こすような項がない．これは，いいかえれば，ε_j に縮退している状態の張る A 次元の部分空間 H_j で $\{v_{j\alpha}\}$ を基底として摂動 H' が対角的な場合である．それなら，一般の場合にも，H_j の基底を選び直して H' を対角化してから，そのあとで摂動論の計算をすればいいではないか．事は，それほど簡単ではない．H' を H_j のなかで対角化しておいても (*6. 1. 18*) の分母は 0 になり得るからである．

しかし，非摂動状態をうまく選んで出発しなければならないというのは本当だ

ろう．摂動がかかっていないときには，$v_{j\alpha}$の勝手な線形結合がハミルトニアンの固有ベクトルだが，摂動をかけたとき，もし$H=H_0+\lambda H'$の固有ベクトルがきまって(6.1.5)のようにλのベキに展開できるものなら，それは$\lambda\to0$で特定の線形結合$\sum_{\alpha=1}^{A}c_\alpha v_{j\alpha}$にゆく．これは，非摂動状態にこの特定の$\sum_{\alpha=1}^{A}c_\alpha v_{j\alpha}$をとって摂動論の計算を始めなければならないということを意味している．

そこで，(6.1.5)の代りに

$$u_j=\sum_{\alpha=1}^{A}c_\alpha v_{j\alpha}+\lambda u_j^{(1)}+\lambda^2 u_j^{(2)}+\cdots \tag{6.1.31}$$

を仮定して項a)の計算をやり直してみよう．係数c_αは未知数である．(6.1.6)はそのまま用いる．

(6.1.31)と(6.1.6)を固有値方程式(6.1.4)に代入し，λの各ベキの項が左辺と右辺でそれぞれに等しいことを要求すれば，λ^0の分は当然なりたち，λ^1の項から

$$H_0u_j^{(1)}+\sum_\alpha c_\alpha H'v_{j\alpha}=E_j^{(1)}\sum_\alpha c_\alpha v_{j\alpha}+\varepsilon_j u_j^{(1)} \tag{6.1.32}$$

がでる．$v_{j\beta}$との内積をつくると，H_0の Hermite 性により両辺から$\langle v_{j\beta}, H_0u_j^{(1)}\rangle=\langle H_0v_{j\beta}, u_j^{(1)}\rangle$がおちて，$c_\alpha$に対する連立1次方程式

$$\sum_\alpha[\langle v_{j\beta}, H'v_{j\alpha}\rangle-E_j^{(1)}\delta_{\beta\alpha}]c_\alpha=0 \tag{6.1.33}$$

が得られる．これは斉次方程式だから，c_αがすべて0というのでない解をもつためには係数の行列式が0でなければならない:

$$\begin{vmatrix} \langle v_{j1}, H'v_{j1}\rangle-E_j^{(1)} & \langle v_{j1}, H'v_{j2}\rangle & \cdots & \langle v_{j1}, H'v_{jA}\rangle \\ \langle v_{j2}, H'v_{j1}\rangle & \langle v_{j2}, H'v_{j2}\rangle-E_j^{(1)} & \cdots & \langle v_{j2}, H'v_{jA}\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle v_{jA}, H'v_{j1}\rangle & \langle v_{jA}, H'v_{j2}\rangle & \cdots & \langle v_{jA}, H'v_{jA}\rangle-E_j^{(1)} \end{vmatrix}=0. \tag{6.1.34}$$

こうして1次の摂動エネルギー$E_j^{(1)}$を定める方程式(**永年方程式**とよぶ)が得られた．これはA次の代数方程式だから一般にA個の根$E_{j\gamma}^{(1)}$，$\gamma=1,2,\cdots,A$をもつ．

いま，重根はないと仮定しよう．$E_{j\gamma}^{(1)}\neq E_{j\gamma'}^{(1)}$ $(\gamma\neq\gamma')$．そうすると各$E_{j\gamma}^{(1)}$に対応して(6.1.33)からA組の解$(c_{\alpha\gamma})=(c_{1\gamma}, c_{2\gamma}, \cdots, c_{A\gamma})$，$\gamma=1,2,\cdots,A$が得られる．$(\langle v_{j\beta}, H'v_{j\alpha}\rangle)$が Hermite 行列なので，これらは互いに直交するベクトル

になる．ついでに規格化をして $\sum_\alpha c_{\alpha\beta}{}^* c_{\alpha\gamma}=\delta_{\beta\gamma}$ にしておくと

$$u_{j\gamma}{}^{(0)} \equiv \sum_\alpha c_{\alpha\gamma} v_{j\alpha} \qquad (\gamma=1, 2, \cdots, A) \tag{6.1.35}$$

が H_j の直交基底となり，はじめに考えたように H' を対角化する：

$$\langle u_{j\beta}{}^{(0)}, H' u_{j\gamma}{}^{(0)}\rangle = E_{j\gamma}{}^{(1)}\delta_{\beta\gamma}. \tag{6.1.36}$$

これは

$$H' u_{j\gamma}{}^{(0)} = E_{j\gamma}{}^{(1)} u_{j\gamma}{}^{(0)} + \tilde{u} \qquad (\tilde{u} \in \mathsf{H}_j{}^\perp)$$

を意味している．$\tilde{u}$ は H_j に垂直な部分空間に属するあるベクトルである．このことを $\tilde{u} \in \mathsf{H}_j{}^\perp$ と記した．

さて，摂動論は，なにか1つの非摂動状態に注目して，それが摂動をかけたときどう変わるかを問題にするのであった．その注目をする非摂動状態として，これからは $u_{j\beta}{}^{(0)}$ をとろう．これが，摂動をかけたとき

$$u_{j\beta} = u_{j\beta}{}^{(0)} + \lambda u_{j\beta}{}^{(1)} + \lambda^2 u_{j\beta}{}^{(2)} + \cdots \tag{6.1.37}$$

に変わるとする．(6.1.31) の c_α としてとくに $c_{\alpha\beta}$ をとったもので，これからすることは (6.1.31) と (6.1.6) から出発した上の解析の続きなのである．ただし，(6.1.6) には添字 β を補って

$$E_{j\beta} = \varepsilon_j + \lambda E_{j\beta}{}^{(1)} + \lambda^2 E_{j\beta}{}^{(2)} + \cdots \tag{6.1.38}$$

としておかなければならない．(6.1.37), (6.1.38) が固有値方程式 (6.1.4) を満たすように $u_{j\beta}{}^{(s)}, E_{j\beta}{}^{(s)}$ を定めるのだが，以前に (6.1.8) でしたように付加的に

$$\langle u_{j\beta}{}^{(0)}, u_{j\beta}{}^{(s)}\rangle = 0 \qquad (s=1, 2, \cdots) \tag{6.1.39}$$

を要求する．(6.1.9) に相当して

$$H_0 u_{j\beta}{}^{(s)} + H' u_{j\beta}{}^{(s-1)} = \sum_{r=0}^{s} E_{j\beta}{}^{(r)} u_{j\beta}{}^{(s-r)} \qquad (s=1, 2, \cdots) \tag{6.1.40}$$

$s=0$ の式は当然なりたっているので仲間に入れないでおく．

(6.1.40) と $u_{j\beta}{}^{(0)}$ との内積をつくると，(6.1.39) のおかげで

$$E_{j\beta}{}^{(s)} = \langle u_{j\beta}{}^{(0)}, H' u_{j\beta}{}^{(s-1)}\rangle. \tag{6.1.41}$$

(6.1.40) と $u_{j\gamma}{}^{(0)}$ $(\gamma \neq \beta)$ との内積をつくると，

$$\langle u_{j\gamma}{}^{(0)}, H' u_{j\beta}{}^{(s-1)}\rangle = E_{j\beta}{}^{(1)}\langle u_{j\gamma}{}^{(0)}, u_{j\beta}{}^{(s-1)}\rangle + \sum_{r=2}^{s-1} E_{j\beta}{}^{(r)}\langle u_{j\gamma}{}^{(0)}, u_{j\beta}{}^{(s-r)}\rangle.$$

この左辺で H' の後に完全系からなる $\sum_\alpha |u_{j\alpha}{}^{(0)}\rangle\langle u_{j\alpha}{}^{(0)}| + \sum_{n\neq j} |v_n\rangle\langle v_n| = 1$ をはさんで (6.1.36) を利用すれば

$$(E_{j\gamma}{}^{(1)}-E_{j\beta}{}^{(1)})\langle u_{j\gamma}{}^{(0)}, u_{j\beta}{}^{(s-1)}\rangle$$
$$=-\sum_{n\neq j}\langle u_{j\gamma}{}^{(0)}, H'v_n\rangle\langle v_n, u_{j\beta}{}^{(s-1)}\rangle+\sum_{r=2}^{s-1}E_{j\beta}{}^{(r)}\langle u_{j\gamma}{}^{(0)}, u_{j\beta}{}^{(s-r)}\rangle \quad (6.1.42)$$

を得る．これに対応する式はa)項の計算にはない．

最後に，(6.1.40)と v_n $(n\neq j)$ との内積をつくると(6.1.11)に対応する式がでる：

$$(\varepsilon_n-\varepsilon_j)\langle v_n, u_{j\beta}{}^{(s)}\rangle=-\langle v_n, H'u_{j\beta}{}^{(s-1)}\rangle+\sum_{r=1}^{s-1}E_{j\beta}{}^{(r)}\langle v_n, u_{j\beta}{}^{(s-r)}\rangle. \quad (6.1.43)$$

こうして得られた(6.1.41), (6.1.42), (6.1.43)をつかうと，sの小さい方から順次に $E_{j\beta}{}^{(s)}, u_{j\beta}{}^{(s)}$ を定めてゆくことができる．まず，$s=1$ では(6.1.42)は $0=0$. (6.1.41)は既知の(6.1.36)になる．(6.1.43)は

$$\langle v_n, u_{j\beta}{}^{(1)}\rangle=\frac{\langle v_n, H'u_{j\beta}{}^{(0)}\rangle}{\varepsilon_j-\varepsilon_n}$$

を与える．$s=2$ の(6.1.42)から得る

$$\langle u_{j\gamma}{}^{(0)}, u_{j\beta}{}^{(1)}\rangle=\frac{1}{E_{j\beta}{}^{(1)}-E_{j\gamma}{}^{(1)}}\sum_{n\neq j}\langle u_{j\gamma}{}^{(0)}, H'v_n\rangle\langle v_n, u_{j\beta}{}^{(1)}\rangle$$

とあわせて

$$u_{j\beta}{}^{(1)}=\sum_{n\neq j}\frac{1}{\varepsilon_j-\varepsilon_n}\left[\sum_{\gamma\neq\beta}\frac{1}{E_{j\beta}{}^{(1)}-E_{j\gamma}{}^{(1)}}u_{j\gamma}{}^{(0)}\langle u_{j\gamma}{}^{(0)}, H'v_n\rangle+v_n\right]\langle v_n, H'u_{j\beta}{}^{(0)}\rangle. \quad (6.1.44)$$

そこで，(6.1.41)にもどって $s=2$ とおき，(6.1.36)に注意すれば

$$E_{j\beta}{}^{(2)}=\sum_{n\neq j}\frac{\langle u_{j\beta}{}^{(0)}, H'v_n\rangle\langle v_n, H'u_{j\beta}{}^{(0)}\rangle}{\varepsilon_j-\varepsilon_n}. \quad (6.1.45)$$

これはa)項の(6.1.15)と同じ形だ．この項のはじめに予想したとおりである．

このあとも計算は機械的くりかえしだから読者の検討にまかせる．ただa)項との違いがでる $E_{j\beta}{}^{(3)}$ の結果だけ書いておこう：

$$E_{j\beta}{}^{(3)}=\sum_{m\neq j}\sum_{n\neq j}\frac{\langle u_{j\beta}{}^{(0)}, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_n\rangle\langle v_n, H'u_{j\beta}{}^{(0)}\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_m)(\varepsilon_j-\varepsilon_n)}$$
$$+\sum_{m\neq j}\sum_{n\neq j}\sum_{\gamma\neq\beta}\frac{\langle u_{j\beta}{}^{(0)}, H'v_m\rangle\langle v_m, H'u_{j\gamma}{}^{(0)}\rangle\langle u_{j\gamma}{}^{(0)}, H'v_n\rangle\langle v_n, H'u_{j\beta}{}^{(0)}\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_m)(E_{j\beta}{}^{(1)}-E_{j\gamma}{}^{(1)})(\varepsilon_j-\varepsilon_n)}$$
$$-\sum_{n\neq j}\frac{E_{j\beta}{}^{(1)}\langle u_{j\beta}{}^{(0)}, H'v_n\rangle\langle v_n, H'u_{j\beta}{}^{(0)}\rangle}{(\varepsilon_j-\varepsilon_n)^2}. \quad (6.1.46)$$

読者は，この式を項a)の(*6.1.17*)から推測できるだろうか？

上の計算では永年方程式(*6.1.34*)に重根はないとしている．非摂動固有状態の縮退は摂動の1次で完全に除かれるとしたのである．もしも重根があると，(*6.1.44*)や(*6.1.46*)の分母に0になるところがでてくる．その場合には，重根 $E_{j\gamma}=E_{j\beta}=\cdots$ となる $u_{j\gamma}{}^{(0)}, u_{j\beta}{}^{(0)}, \cdots$ の間でユニタリー変換をして

$$W_{\gamma\beta}\equiv\sum_{n\neq j}\frac{\langle u_{j\gamma}{}^{(0)}, H'v_n\rangle\langle v_n, H'u_{j\beta}{}^{(0)}\rangle}{\varepsilon_j-\varepsilon_n}$$

を対角化しなければならない．詳しく考えることは読者の演習にまかせよう．

摂動級数の漸近級数性について縮退なしの場合に項a)で与えた注意は，縮退ありのこんどの場合にもあてはまる．

なお，(*6.1.34*)のところでしたことは，非摂動固有状態 $\{v_1, v_2, \cdots, v_{j1}, \cdots, v_{jA}, v_{j+1}, \cdots\}$ を基底とするハミルトニアン $H=H_0+\lambda H'$ の行列表示で，縮退した状態 $\{v_{j1}, \cdots, v_{jA}\}$ に関わる部分行列をまず対角化することであったともいえる．これは，縮退までいかなくても，注目する状態に非常に近接した準位がある場合に有効な近似法である．

Stark効果は，こんどの場合にもよい例題になる．まえに例とした水素原子では，非摂動状態は基底状態のほかすべて n^2 重に縮退している．第1励起状態($n=2$)なら2s状態と2p状態をあわせて4重の縮退．しかし，ハミルトニアンを(*6.1.24*)とすると，選択則(*6.1.26*)のおかげで永年方程式(*6.1.34*)の行列は2×2の行列1つと1×1の行列2つになってしまう．非摂動固有状態を $|n, l, m\rangle$ と書いて，

$$\begin{array}{c|cc:c:c|}
 & |2,0,0\rangle & |2,1,0\rangle & |2,1,1\rangle & |2,1,-1\rangle \\
\langle 2,0,0| & -E_2{}^{(1)} & H_{01}' & 0 & 0 \\
\langle 2,1,0| & H_{10}' & -E_2{}^{(1)} & 0 & 0 \\
\hdashline
\langle 2,1,1| & 0 & 0 & -E_2{}^{(1)} & 0 \\
\hdashline
\langle 2,1,-1| & 0 & 0 & 0 & -E_2{}^{(1)}
\end{array}=0$$

ここに

$$H_{01}'=H_{10}'\equiv\langle 2,0,0|H'|2,1,0\rangle=-3eFa_B.$$

この程度の計算では無次元化をするまでもあるまい．永年方程式の根および対応する状態(*6.1.35*)を書けば

$$E_{21}{}^{(1)} = 3eFa_{\mathrm{B}} \quad : \quad u_{21}{}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[|2,1,0\rangle - |2,0,0\rangle]$$

$$E_{22}{}^{(1)} = -3eFa_{\mathrm{B}} : \quad u_{22}{}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[|2,1,0\rangle + |2,0,0\rangle]$$

$$E_{23}{}^{(1)} = 0 \quad : \quad u_{23}{}^{(0)} = |2,1,1\rangle$$

$$E_{24}{}^{(1)} = 0 \quad : \quad u_{24}{}^{(0)} = |2,1,-1\rangle.$$

第1励起状態の縮退は部分的にしか除かれないわけである．電子は，エネルギーの高い $u_{21}{}^{(0)}$ 状態では電場の方向に，エネルギーの低い $u_{22}{}^{(0)}$ 状態では電場と反対の方向にかたよっている(図6.3)．縮退した準位にある原子にいったん電場 F をかけて，ゆっくり $F\to 0$ にすると，このように永久電気双極子をもつ状態ができる．この点，$F\to 0$ で消える基底状態の誘導分極とちがう．

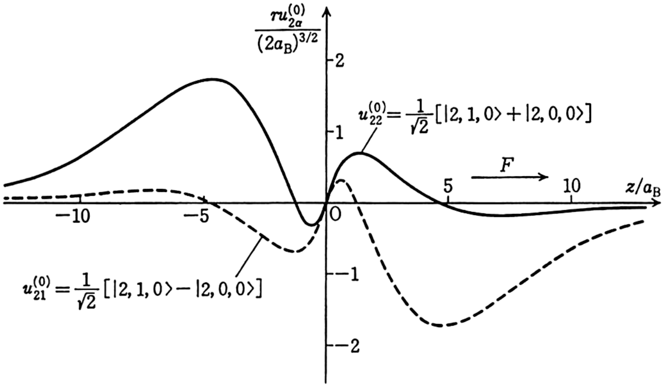


図6.3 分極した水素原子の波動関数．$u_{2\alpha}{}^{(0)}(\alpha=1,2)$ に r を掛けて，その2乗が 電子の存在確率/$dr\sin\theta d\theta d\varphi$ を表すようにし，z 軸上での値を示す．

永年方程式は一般に大きい行列式になり計算がたいへんなものだが，上の例のように摂動 H' の行列が小さいブロックに分かれるなら，あるいは，そうなるように基底があらかじめ選べるならば手間が減る．その工夫をするのには系の対称性にもとづく群論的考察が役にたつ．上の例では，摂動 H' が z 軸まわりに回転対称なので，この対称変換の固有状態が基底に選んであったために，その固有値 m ごとに摂動の行列がブロック化したのであった．

この考察を水素原子の第2励起状態 $(n=3)$ に適用すると，摂動 H' の行列は $m=0$ の $\{|3,0,0\rangle, |3,1,0\rangle, |3,2,0\rangle\}$ のブロック，$m=1$ の $\{|3,1,1\rangle, |3,2,1\rangle\}$ のブ

ロック，$m=2$ の $\{|3,2,2\rangle\}$ のブロック，…のように分かれることが知れる．

さらに選択規則(*6.1.26*)を考察すれば，H' の行列の $m=0$ のブロックはトレース 0，行列式 0 とわかり，したがって，固有値 $E_3{}^{(1)}$ は 0，$\pm A$ のように 0 をはさんで正負に対称に位置する．$m=1$ のブロックの固有値は $\pm B$ の形である．$m=-1$ のブロックは，時間反転または空間の鏡映を考えることにより，やはり $\pm B$ を固有値とすることがわかる．$m=2$ のブロックが固有値 0 をもつことは，いうまでもない．こうして，水素原子の $n=3$ の準位は電場によって図 6.4(a) に示すように 5 本の準位に分裂する．ここまでは H' の行列要素を計算しなくてもいえるのだ．行列要素を計算すると，準位の分裂が等間隔で，その間隔は $n=2$ の場合の 3/2 倍であることがわかる．

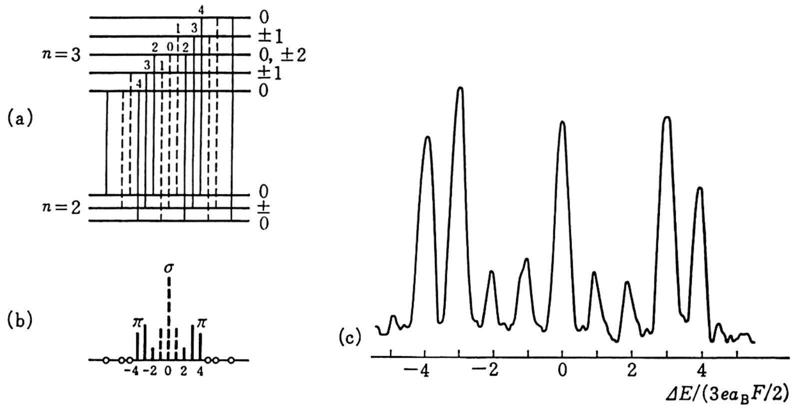


図 6.4 水素原子の H_α 線の Stark 効果．(a) $n=2,3$ の準位の電場 F による分裂．縦の実線は m の変化 $\Delta m=0$ の遷移，点線は $\Delta m=\pm1$ の遷移．前者はスペクトルの π 成分をつくり，後者は σ 成分をつくる．(b) スペクトル線のエネルギーのずれ ΔE(横軸)と強度(縦軸)．○は極めて弱い線を示す．(c) フォト・メトリーによる強度曲線(Mark, H. & Wierl, R.: *Zs. f. Phys.*, 55, 156 (1929) より)．

図 6.4(a) には $n=2$ の準位の分裂も描いてある．準位を結ぶ縦の線は電子の可能な遷移を示す．各遷移にともなって出る光の振動数は左から右へ順に大きくなる．それを下の図 6.4(b) に示す．縦棒の長さが強度の理論値に比例し，付記した数値は光のエネルギーのずれを $(3/2)ea_\mathrm{B}F$ 単位で示すものである．これは実験の与える強度曲線(図 6.4(c)) とよく一致している．

原子にかける電場 F が強くなると高次の摂動項が無視できなくなる．その様

子を水素原子の H_γ 線 ($n=5 \to n=2$ の遷移による) の1成分について図6.5に示そう．曲線 I, II, III がそれぞれ1次，2次，3次までの摂動計算の結果で，実験値∘は I, II にはのらず III にのっている．

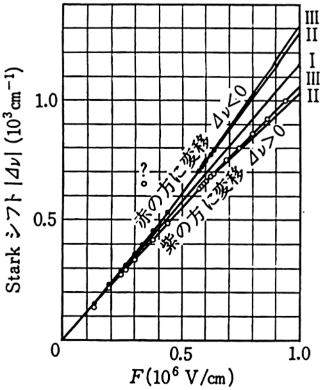


図6.5　高次の Stark 効果．水素の H_γ 線の1成分 (π 18) について，電場 F に関し1次，2次，3次まで含めた理論の結果 (Ishida, Y. & Hiyama, S.: *Sci. Pap. IPCR*, Nr. 152 (1928)) をそれぞれ曲線 I, II, III で示す．実験結果は $F<0.63\times10^6$ (V/cm) に対しては Gebauer, R. & Rausch von Traubenberg, H.: *Zs. f. Phys.* **71**, 291 (1931) より，それ以上の F に対しては Bethe, H: *Hdb. d. Phys.*, Bd. XXV, Springer, 1930 の p. 410 より．なお Gebauer らの *Zs. f. Phys.* **56**, 254 (1929) も参照した．

§6.2　時間発展を定める摂動論

Schrödinger 描像では系の運動を状態ベクトル ψ_t の時間発展としてとらえる．その運動方程式

$$i\hbar\frac{d\psi_t}{dt} = (H_0+H')\psi_t \tag{6.2.1}$$

を初期条件

$$\psi_{t=0} = v_j \tag{6.2.2}$$

のもとで解くのが，これからの問題である．ここに v_j は非摂動ハミルトニアン H_0 の固有ベクトルの1つである．記号は前節のものを流用するが，この節では摂動 H' が H_0 の固有ベクトルに関して対角要素をもたないとする：

$$\langle v_n, H'v_n\rangle = 0 \qquad (\text{すべての } n). \tag{6.2.3}$$

こうしても一般性が失われることはない．これが成り立っていないときには，行列表示で $\langle v_n, H'v_m\rangle - \langle v_n, H'v_n\rangle\delta_{nm}$ と表される演算子をあらためて H' にとり，そのかわり $\langle v_n, H_0v_m\rangle + \langle v_n, H'v_n\rangle\delta_{nm}$ に当る演算子を H_0 とすればよい．そのときには $\varepsilon_n + \langle v_n, H'v_n\rangle$ をあらためて ε_n とよぶことにする．

初期条件 (6.2.2) は特殊な形をしている．後の遷移確率の計算にこの形が使わ

れるということもあるが，任意の初期条件が v_n の重ね合せで書け，Schrödinger 方程式は線形なので，それに応ずる解は各 v_n に応ずる解の重ね合せとなるから，ここでも一般性は失われていない．

a）くりこみ法

摂動の考えで(6.2.1)を解くので，パラメーター λ を入れて

$$i\hbar\frac{d\psi_t}{dt} = (H_0+\lambda H')\psi_t \tag{6.2.4}$$

を扱う．解を非摂動固有状態で展開した形

$$\psi_t = \sum_m v_m c_m(t) e^{-iE_m t/\hbar} \tag{6.2.5}$$

に求めよう．$c_m(t)$ と，それから E_m が未知数である．これでは $c_m(t)$ と E_m が別々には定まらないといぶかる読者もいるだろう．まあ，しばらくつきあってください．(6.2.5)の $\sum_m$ には必要なら連続固有値にわたる積分も含める．この ψ_t を Schrödinger 方程式(6.2.4)に代入し，v_n との内積をとれば，$c_n(t)$ に対する連立微分方程式

$$i\hbar\frac{dc_n(t)}{dt} = \sum_m \{\lambda\langle v_n, H'v_m\rangle - \varDelta E_n\delta_{nm}\} c_m(t) e^{-i(E_m-E_n)t/\hbar} \tag{6.2.6}$$

が得られる．ただし，$\varDelta E_n \equiv E_n - \varepsilon_n$．初期条件は(6.2.2)から

$$c_m(0) = \delta_{mj}. \tag{6.2.7}$$

この連立微分方程式を解くために，摂動展開

$$c_n(t) = c_n{}^{(0)}(t) + \lambda c_n{}^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n{}^{(2)}(t) + \cdots \tag{6.2.8}$$

$$\varDelta E_n \equiv E_n - \varepsilon_n = \lambda^2 E_n{}^{(2)} + \cdots \tag{6.2.9}$$

を仮定しよう．$\varDelta E_n$ に λ の1次の項がないのは仮定(6.2.3)による．これらを(6.2.6)に代入して――指数関数の肩の E_m, E_n は展開しない――両辺で λ のベキの等しい項を比べる．初期条件(6.2.7)は $c_m{}^{(0)}(0) = \delta_{mj}$，$c_m{}^{(s)}(0) = 0\ (s \neq 0)$ となる．これで $c_n{}^{(s)}(t), E_n{}^{(s)}$ が s の小さいほうから順に定まってゆくだろう．まず両辺の λ^0 の項がたがいに等しいことから

$$i\hbar\frac{dc_n{}^{(0)}(t)}{dt} = 0.$$

よって，初期条件も考慮し

$$c_n{}^{(0)}(t) = \text{const.} = \delta_{nj}. \tag{6.2.10}$$

次に(6.2.6)の両辺の λ^1 の項を比べ，(6.2.10)も参照して

$$i\hbar\frac{dc_n{}^{(1)}(t)}{dt}=\langle v_n, H'v_j\rangle e^{-i(E_j-E_n)t/\hbar}.$$

初期条件は $c_n{}^{(1)}(0)=0$ だから，(6.2.3)を思い出して

$$c_n{}^{(1)}(t)=\frac{\langle v_n, H'v_j\rangle}{E_j-E_n}(e^{-i(E_j-E_n)t/\hbar}-1)\qquad(n\neq j)\qquad(6.2.11)$$

$$c_j{}^{(1)}(t)=0.\qquad(6.2.12)$$

λ^2 の項にゆくと

$$i\hbar\frac{dc_n{}^{(2)}(t)}{dt}=\sum_m\{\langle v_n, H'v_m\rangle c_m{}^{(1)}(t)-E_n{}^{(2)}\delta_{nm}c_m{}^{(0)}(t)\}e^{-i(E_m-E_n)t/\hbar}.$$

ただし，右辺{　}内の第1項は $m=n$ のとき(6.2.3)により0である．これに(6.2.11), (6.2.12)の $c_n{}^{(1)}$ を入れて整理すれば

$$i\hbar\frac{dc_n{}^{(2)}(t)}{dt}=\sum_{m\neq j,n}\frac{\langle v_n, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_j\rangle}{E_j-E_m}(e^{-i(E_j-E_n)t/\hbar}-e^{-i(E_m-E_n)t/\hbar})-E_n{}^{(2)}\delta_{nj}$$

よって，$n\neq j$ なる n に対しては

$$c_n{}^{(2)}(t)=\sum_{m\neq j,n}\frac{\langle v_n, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_j\rangle}{(E_j-E_n)(E_j-E_m)}(e^{-i(E_j-E_n)t/\hbar}-1)$$
$$-\sum_{m\neq j,n}\frac{\langle v_n, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_j\rangle}{(E_j-E_m)(E_m-E_n)}(e^{-i(E_m-E_n)t/\hbar}-1).\qquad(6.2.13)$$

ところが $n=j$ に対しては，

$$i\hbar\frac{dc_j{}^{(2)}(t)}{dt}=\sum_{m\neq j}\frac{\langle v_j, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_j\rangle}{E_j-E_m}(1-e^{-i(E_m-E_j)t/\hbar})-E_j{}^{(2)}$$

となり，このまま時間積分すると t に比例する項が現れる．そのような項を**永年項**とよぶが，正確な解(4.5.24)には，こんな項はない．そこで

$$E_j{}^{(2)}=\sum_{m\neq j}\frac{|\langle v_m, H'v_j\rangle|^2}{E_j-E_m}\qquad(6.2.14)$$

にとって，それを消そう．そうすると

$$c_j{}^{(2)}(t)=\sum_{m\neq j}\left|\frac{\langle v_m, H'v_j\rangle}{E_j-E_m}\right|^2(e^{-i(E_m-E_j)t/\hbar}-1).\qquad(6.2.15)$$

この計算はいくらでも続けることができ，摂動展開(6.2.8), (6.2.9)の係数が順次に定まってゆく．$E_n{}^{(s)}$ のほうは次々に現れる永年項を消すことで定まるのである．

ここで，これまでの結果を(6. 2. 8)，(6. 2. 9)に入れて E_j と(6. 2. 5)の ψ_t をつくってみよう．まず

$$E_j = \varepsilon_j + \lambda^2 \sum_{m \neq j} \frac{|\langle v_m, H' v_j \rangle|^2}{E_j - E_m} + \cdots \tag{6. 2. 16}$$

これは前節の定常状態を定める摂動論で得た E_j の式と同じ形をしている．λ の1次の項 $\langle v_j, H'v_j \rangle$ が欠けているが，これは始めに ε_j にくりこんでおいたのだった．前節の(6. 1. 15)と比べると，エネルギー分母がちがっている．(6. 1. 15)では，エネルギー分母に非摂動エネルギーがきていた．こんどは E_j を定めるのにも，(6. 2. 16)に当る式を他の E_n に対しても書いて連立方程式を解かねばならない．しかし，いまの λ の2次までの近似では，どちらでも同じことである．(6. 2. 16)は，他の E_n に対する式とあわせて，全ハミルトニアン $H = H_0 + \lambda H'$ の固有値を定める方程式なのである．これを導出した人の名に因んで **Brillouin-Wigner の摂動公式**とよぶ［Kramers］．前節の式には Schrödinger の名がついている．

(6. 2. 16)から定まる E_j が H の固有値であることは，(6. 2. 5)によって状態ベクトルの時間発展を書き下してみると，もっとよく納得されるだろう．簡単な計算により，

$$\psi_t = \sum_n a_n u_n e^{-iE_n t/\hbar} \tag{6. 2. 17}$$

と書けることがわかる．上の計算から知れるのは積 $a_n u_n$ だけであるが，それを，意味がわかりやすいように a_n と u_n に分けて書くのである．まず u_n だが，$n=j$ では，

$$u_j = \left\{1 - \frac{1}{2}\lambda^2 \sum_{m \neq j} \left| \frac{\langle v_m, H'v_j \rangle}{E_j - E_m} \right|^2 \right\} v_j + \lambda \sum_{m \neq j} v_m \frac{\langle v_m, H'v_j \rangle}{E_j - E_m}$$
$$+ \lambda^2 \sum_{m \neq j} \sum_{l \neq j} v_m \frac{\langle v_m, H'v_l \rangle \langle v_l, H'v_j \rangle}{(E_j - E_m)(E_j - E_l)} + \cdots \tag{6. 2. 18}$$

とすることができる．そして，$n \neq j$ では

$$u_n = v_n + \lambda \sum_{m \neq n} v_m \frac{\langle v_m, H'v_n \rangle}{E_n - E_m} + \cdots. \tag{6. 2. 19}$$

いずれも上の計算からは…の項は得られない．近似を上げてそこまで計算したら u_n も u_j も同じ形になるだろう．これらは前節の(6. 1. 18)，すなわち全ハミルトニアン $H = H_0 + \lambda H'$ の固有状態にほかならない！　エネルギー分母はちがうが，エネルギー固有値の場合と同様，こんどの式が Brillouin-Wigner の摂動公式に

なったまでである．いまのλの2次までの近似では公式の形に差はない．ただ，u_jの式の第1項でv_jの係数が目新らしい．これは規格化因数である．u_jの表式の全体にかかるべきものだが，λの2次までの近似ではこれでよい．前節の計算ではu_jを規格化しないで(6.1.7)を要求したのだった．こうして，(6.2.17)は全ハミルトニアン$H=H_0+\lambda H'$の定常状態$u_n e^{-iE_n t/\hbar}$の1次結合になっていることがわかった！

では，係数a_nはどうなるか．上のようにu_nをとると，$n=j$では

$$a_j = 1-\frac{1}{2}\lambda^2 \sum_{m\neq j}\left|\frac{\langle v_m, H'v_j\rangle}{E_j-E_m}\right|^2+\cdots. \qquad (6.2.20)$$

$n\neq j$では

$$a_n = \lambda\frac{\langle v_n, H'v_j\rangle}{E_n-E_j}+\lambda^2\sum_{l\neq n}\frac{\langle v_n, H'v_l\rangle\langle v_l, H'v_j\rangle}{(E_n-E_j)(E_n-E_l)}+\cdots. \qquad (6.2.21)$$

これらは，それぞれ(6.2.18)，(6.2.19)からわかるとおり$\langle u_j, v_j\rangle$，$\langle u_n, v_j\rangle$に等しい．(6.2.17)で初期条件$v_j=\sum_n a_n u_n$からa_j, a_n $(n\neq j)$を定めたのと同じ結果になっているのだ！ このことから$\|\psi_t\|^2=1$が知れる．

時間発展の摂動計算は，結果(6.2.17)において，全ハミルトニアン$H=H_0+\lambda H'$の固有値E_nと固有関数u_nとが(Brillouin-Wigner の摂動公式から)知れているとして(4.5.24)の一般的処方を適用したのと同じことになった．E_nとu_nは前節の Schrödinger の摂動公式から求めてもよいので，この意味では，この節の計算は必要がなかったともいえる．

ふつう，時間発展を摂動論で定めるのには，(6.2.5)でなく，非摂動ハミルトニアンH_0による時間変化を$e^{-i\varepsilon_m t/\hbar}$のようにくくりだして

$$\psi_t = \sum_m v_m b_m(t) e^{-i\varepsilon_m t/\hbar} \qquad (6.2.22)$$

とおき，$b_m(t)$を摂動論で定める．これでは永年項の消しようがないが，永年項を高次まで計算すると，それらが$b_m(t)$ごとに$e^{-i\Delta E_m t/\hbar}$の形にまとまって，結果は当然のことながら(6.2.17)に一致するのである．状態ベクトルの時間発展は$\{b_m(t)\}$で表すことができる．(6.2.22)は，(4.5.26)に従って$e^{iH_0 t/\hbar}$をかけると右辺の$e^{i\varepsilon_m t/\hbar}$が落ちて相互作用描像の(4.5.29)になる．

この節の(6.2.6)も相互作用描像における運動方程式にはちがいない．ただし，$H=H_0+\lambda H'$を非摂動ハミルトニアンと摂動に分けるのに，$\{v_n\}$による行列表示

でいって，それぞれを

$$\langle v_n, \tilde{H}_0 v_m\rangle = \langle v_n, H_0 v_m\rangle + \varDelta E_n \delta_{nm}$$
$$\langle v_n, \tilde{H}' v_m\rangle = \langle v_n, H' v_m\rangle - \varDelta E_n \delta_{nm}$$

とした．この非摂動ハミルトニアンの固有値は，摂動のかかった準位の E_n である．摂動による各準位のエネルギーのずれ $\varDelta E_n$ は非摂動ハミルトニアンにくりこんだわけだ．**くりこみ理論**のアイディアである．数学で Poincaré-Lighthill-Kuo の名でよばれる近似法の特別の場合でもある．

b) 遷移確率

(6.2.5)の展開係数の絶対値2乗

$$p_{n\leftarrow j}(t) \equiv |c_n(t)|^2 \tag{6.2.23}$$

は，時刻0に状態 v_j に用意した系が，摂動 $\lambda H'$ をうけて運動し，時刻 t に観測したとき状態 v_n に見出される確率を与える．ここで状態というのは，いずれも非摂動ハミルトニアン H_0 の固有状態であって，そのどれが実現されているかを定める類の観測が，状態を時刻0に用意し時刻 t に同定するために行われることを前提している．この前提の妥当性は，問題にする場合ごとに検討すべきものである．v_j を**始状態**，v_n を**終状態**とよぶ．(6.2.21)の下に注意したとおり，摂動計算を高次までやりとげればたしかに $\|\psi_t\|^2=1$ となり，したがって，$\sum_n |c_n(t)|^2=1$，すなわち

$$\sum_n p_{n\leftarrow j}(t) = 1 \tag{6.2.24}$$

となるはずである(確率の保存)．

いま，終状態 $n\neq j$ に注目し，$c_n(t)$ をさきに求めた第2近似まで書いてみよう．(6.2.11)と(6.2.13)から

$$c_n(t) = \left[\lambda\langle v_n, H'v_j\rangle + \lambda^2 \sum_{m\neq j} \frac{\langle v_n, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_j\rangle}{E_j - E_m}\right] \frac{e^{-i(E_j-E_n)t/\hbar}-1}{E_j - E_n}$$
$$-\lambda^2 \sum_{m\neq j} \frac{\langle v_n, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_j\rangle}{E_j - E_m} \frac{e^{-i(E_m-E_n)t/\hbar}-1}{E_m - E_n}. \tag{6.2.25}$$

量子力学の応用上に重要なのは，つぎのような場合である．終状態 n が H の連続スペクトルに属し，あるいは連続とまでいかなくても準位の極めて密なところにあって，有限時間に行われる観測が不確定性原理のため個々の準位を区別し得ず，いきおい量子数のある範囲 $\varDelta$ に含まれる状態への遷移の確率の和

$$P_{\Delta\leftarrow j}(t) = \sum_{n\in\Delta} |c_n(t)|^2 \tag{6.2.26}$$

だけが問題となる場合，しかも，終状態の観測までの時間 t が十分に長いという場合がそれである．Δ のエネルギー幅を同じ文字で表し，終状態の準位間隔を D_1 の程度，H' の行列要素が目立つ変化を示すエネルギー幅を D_2 としていえば

$$\hbar/\Delta,\ \hbar/D_2 \ll t \ll T, \qquad D_1 \ll \Delta. \tag{6.2.27}$$

ただし，t に関する条件を考える理由，および T が何であるかは，間もなく明らかにする．

$P_{\Delta\leftarrow j}(t)$ を計算する手始めに，まず摂動の1次の項だけをとってみよう．

$$P_{\Delta\leftarrow j}(t) = \sum_{n\in\Delta} \lambda^2 |\langle v_n, H'v_j\rangle|^2 \frac{4\sin^2\dfrac{E_n-E_j}{2\hbar}t}{(E_n-E_j)^2}.$$

大きい t に対して，$\sin^2 xt/x^2$ は $x=0$ を中心に幅 π/t の程度で高さ t^2 の鋭いピークをもつ関数なので(図6.6)，仮定 $\hbar/t \ll D_2$ から

$$P_{\Delta\leftarrow j}(t) = \left\{\sum_{n\in\Delta} \lambda^2 |\langle v_n, H'v_j\rangle|^2 \delta(E_n-E_j)\right\} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{4\sin^2\dfrac{E_n-E_j}{2\hbar}t}{(E_n-E_j)^2} dE_n \tag{6.2.28}$$

とすることができる．エネルギーに関する和を積分にしたのは仮定 $D_1 \ll \Delta$ によ

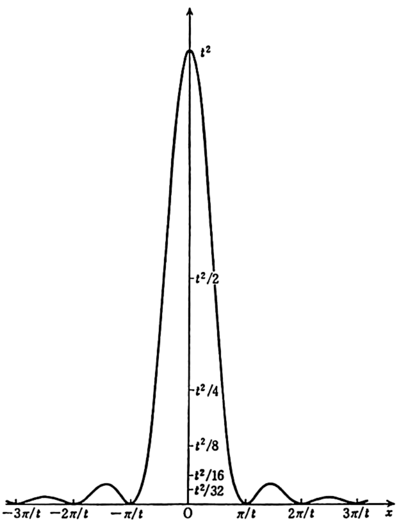


図6.6　$\sin^2 xt/x^2$ のグラフ．$x=0$ を中心とする‘主峰’を高さ t^2，底辺の長さ $2\pi/t$ の三角形とみれば，その面積がちょうど

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\sin^2 xt/x^2)\, dx = \pi t$$

に等しい．

り，積分範囲を $-\infty$ から $+\infty$ までに拡げたのは仮定 $\hbar/t \ll \Delta$ による．積分の値は $2\pi t/\hbar$ なので

$$P_{\Delta\leftarrow j}(t) = t\cdot\sum_{n\in\Delta}\frac{2\pi}{\hbar}|\lambda\langle v_n, H'v_j\rangle|^2\delta(E_n-E_j). \qquad (6.2.29)$$

この結果が t に比例していることに注意しよう．確率だから1を越えるはずがないのに t とともに増す一方という答が出たのは，摂動論の限界を示すものである．(6.2.27) の $t\ll T$ はこのことを考慮した制限であって，T は $P_{\Delta\leftarrow j}(T)=1$ のようにとっておけばよい．

摂動の2次の項をとりいれるのに，(6.2.25) にある λ^2 の2項——順にⅠ，Ⅱとよぶ——は，やや異なった扱いを要する．項Ⅰは，上に $\delta(E_n-E_j)$ を与えたのと同じ因子を含んでいるから，すぐ (6.2.29) にくりこめそうに思われるだろう．しかし，それほど簡単ではない．もう1つのエネルギー分母 E_j-E_m が0になるかもしれないからである．たしかに，仮定 (6.2.3) により中間状態 m の和から $m=j$ は除かれているが，縮退ということがあり得るし，連続スペクトルの場合にも問題がおこる．

(6.2.25) の項Ⅱでは $|E_m-E_n|<2\pi\hbar/t$ の中間状態 m 以外はたいした寄与をしないだろう．そこで，もし $E_n-E_j\cong 0$ でないなら，もう1つのエネルギー分母も $E_j-E_m\cong 0$ でないことになり，$\sum_m$ をするとき (6.2.26) でしたように変化のゆるやかな因子を和の外に出すことができる．そうすると

$$\int_{|E_m-E_n|<D_2}\frac{e^{-i(E_m-E_n)t/\hbar}-1}{E_m-E_n}dE_m \xrightarrow[t\to\infty]{} -i\pi$$

のため，t に比例する (6.2.27) に比べられるような大きい寄与はないことになる．

やはり，重要なのは $E_n-E_j\cong 0$ の場合なのだ．この場合に限って，あらためて (6.2.25) の $\sum_m$ を考えよう．小さい $\varepsilon>0$ をとると，$|E_j-E_m|>\varepsilon$ では項Ⅱはたいした寄与をしない．項Ⅰの寄与は，$\langle v_n, H'v_m\rangle\langle v_m, H'v_j\rangle\equiv Q_{nmj}$ と書いて

$$\left[\lambda^2\sum_{m\neq j}Q_{nmj}\frac{\mathcal{P}}{E_j-E_m}\right]\frac{e^{-i(E_j-E_n)t/\hbar}-1}{E_j-E_n} \qquad (6.2.30)$$

となる．ただし，$|E_j-E_m|>\varepsilon$ でとる和を $\varepsilon\downarrow 0$ にして Cauchy の主値の意味の積分にした．$\mathcal{P}$ はその記号である．

つぎに $|E_j-E_m|<\varepsilon$ では，項Ⅰ，Ⅱをいっしょにして

$$\lambda^2\sum_{m\neq j}Q_{nmj}\delta(E_j-E_m)\int_{E_j-\varepsilon}^{E_j+\varepsilon}\frac{dE_m}{E_j-E_m}\left(\frac{e^{-i(E_j-E_n)t/\hbar}-1}{E_j-E_n}-\frac{e^{-i(E_m-E_n)t/\hbar}-1}{E_m-E_n}\right) \tag{6.2.31}$$

を考える．E_m を複素変数とみれば，被積分関数は $E_m=E_j$ で正則だから，積分路は $E_j+\varepsilon$ と $E_j-\varepsilon$ を端とする下半面の半円に変えてもよい．なぜ上半面にゆかないのかは，すぐ後でわかる．この積分は，変数を

$$(E_m-E_j)t/\hbar\equiv z,\qquad (E_n-E_j)t/\hbar\equiv x$$

に直せば計算しやすい：

$$\frac{t}{\hbar}\int_{C_t}\frac{1}{z}\left(\frac{e^{ix}-1}{x}-\frac{e^{i(x-z)}-1}{x-z}\right)dz\xrightarrow[t\to\infty]{}\frac{i\pi t}{\hbar}\frac{e^{ix}-1}{x}.$$

C_t は図6.7に示す積分路で，$t\to\infty$ とともに半径が大きくなるため被積分関数の第2項は無視できることになるのである．

こうして，(6.2.25)が，(6.2.27)の条件のもとでは

$$c_n(t)=\left[\lambda\langle v_n,H'v_j\rangle+\lambda^2\sum_{m\neq j}\langle v_n,H'v_m\rangle\langle v_m,H'v_j\rangle\left\{\frac{\mathcal{P}}{E_j-E_m}+i\pi\delta(E_j-E_m)\right\}\right]\cdot\frac{e^{-i(E_j-E_n)t/\hbar}-1}{E_j-E_n} \tag{6.2.32}$$

となることがわかった．これに応じて(6.2.29)の第2次近似がどうなるか，あらためて式を書き下すまでもあるまい．

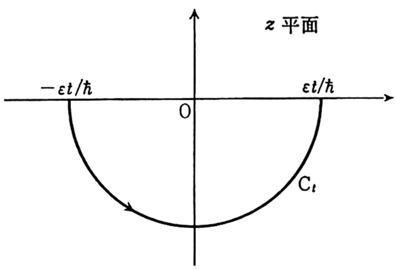


図6.7

この近似まで進めても，$P_{\Delta\leftarrow j}(t)$ が t に比例することは変わらない．はじめ状態 j にいた系が時刻 t に状態群 Δ のなかに見出される確率が t に比例するので，$j\to\Delta$ の遷移は一定の速さで起こるといってよい．その速さ $dP_{\Delta\leftarrow j}(t)/dt\equiv w_{\Delta\leftarrow j}$ を**遷移確率**とよぶ習慣である．むしろ，遷移の確率速度とでもよぶほうがふさわしいだろう．上の結果を公式として書いておけば

$$w_{\Delta\leftarrow j}=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{n\in\Delta}\left|\lambda\langle v_n,H'v_j\rangle+\lambda^2\sum_{m\neq j}\frac{\langle v_n,H'v_m\rangle\langle v_m,H'v_j\rangle}{E_j-E_m-i\varepsilon}\right|^2\delta(E_n-E_j) \tag{6.2.33}$$

ここで

$$\frac{\mathcal{P}}{E_j-E_m}+i\pi\delta(E_j-E_m)=\frac{1}{E_j-E_m-i\varepsilon} \qquad (\varepsilon\downarrow 0) \qquad (6.2.34)$$

と書く習慣にしたがった．やかましくいえば，ここの δ 関数には $2\pi\hbar/t$ 程度の幅がある(図 6.6 を見よ)．(*6.2.33*)は，この程度の不確定の範囲で量子力学的遷移 $j\to\Delta$ には**エネルギーの保存**が成り立つことを示している．

(*6.2.33*)の $|\cdots|$ 内の第 2 項を右端から読んで，最初に状態 v_j にいた系が摂動 $\lambda H'$ のせいで v_m に遷移し，つぎの遷移で v_n にいたるという描像がつくられる．この v_m を**中間状態**とよぶ．おなじ言葉を定常状態の摂動論でもつかうが，おそらく起源は遷移の摂動論のほうにあったのだろう．

(*6.2.34*)にも見えるとおり，こんどの中間状態への遷移にはエネルギーを保存するものと，しないものがある．後者を**仮想遷移**とよび，それに対して前者を**実の遷移**とよぶ．

§6.3 断熱近似

たとえば原子に電場や磁場をかける場合，その場が 0 からはじまって所期の値に達するまでの過程は，原子の時間スケールで見れば極めてゆっくりしたものであるだろう．あえて古典力学的描像でいえば，水素原子の電子が Bohr 軌道を一周する時間はおよそ 10^{-16}(s) にすぎないのだ．この節では，このようにゆっくり変わる摂動がはたらく場合の近似法を考えよう．

それは，分子や核力の問題にも応用できるはずだ．分子でいえば，原子核は重くてゆっくりとしか動けないから，その位置のずれによっておこる相互作用のちがいを上の意味の摂動とみなすことができるだろう．第 0 近似は原子核の位置を固定して電子の運動を解くことになる．そうすると電子の運動エネルギー固有値 ε は原子核を固定した位置によるだろう．2 原子分子なら核間距離 R による．この $\varepsilon=\varepsilon(R)$ が，つぎの近似で原子核の運動を問題にするとき，核の電荷による Coulomb ポテンシャルに加わって核間ポテンシャルを与えることになるのではないか．

a) 断熱定理

いま，時間 t に t/T の形であらわに依存するハミルトニアン $H(t/T)$ があたえ

られたとし，その固有値問題

$$H(\tau)u_n(\tau) = E_n(\tau)u_n(\tau) \qquad (\tau \equiv t/T) \tag{6.3.1}$$

は完全に解けていて，固有値はすべて離散的で，$\{u_n\}$ は完全正規直交系をなすものとしておく．もし

［仮定 1］ $$\left|\frac{1}{E_n(\tau)-E_m(\tau)}\left\langle u_n(\tau), \frac{\partial H}{\partial \tau}u_m(\tau)\right\rangle\right| \leqq M_{nm} \tag{6.3.2}$$

をすべての $0 \leqq \tau \leqq 1$, n, m に対して保証する定数行列 M があれば，時刻 0 に状態 $u_j(0)$ にあった系が時刻 t に $u_n(t/T)$ に移っている確率振幅は任意の $0 \leqq t \leqq T$ で

$$c_{nj} = \delta_{nj} + O(1/T) \qquad (T \to \infty) \tag{6.3.3}$$

となる．これを**断熱定理**という．

T を大きくすることはハミルトニアンの時間変化 $H(t/T)$ をゆっくりにすることで，そのとき漸近的に確実に系は状態 $u_n(t/T)$ をたどってゆく．これが断熱定理の内容である．実は，いくつか付加的な仮定が必要だが，それは証明のなかで述べる．

断熱定理を証明するには，運動方程式

$$i\hbar\frac{\partial \psi_t}{\partial t} = H(t/T)\psi_t, \qquad \psi_{t=0} = u_j(0)$$

を解くのだが，(6.2.5) にならって

$$\psi_t = \sum_m u_m(\tau)c_m(\tau\,;T)e^{-i\int_0^t \omega_m(t'/T)dt'} \qquad (\tau \equiv t/T) \tag{6.3.4}$$

とおき，係数 $c_m(\tau\,;T)$ を定めることにしよう．c_m は τ のみでなく T にもよるだろう．(6.3.3) を証明するには，これが大事な点である．なお

$$\hbar\omega_m(\tau) \equiv E_m(\tau) - i\hbar\langle u_m(\tau), du_m(\tau)/dt\rangle. \tag{6.3.5}$$

右辺の第 2 項は，$d/dt = T^{-1}d/d\tau$ を $\langle u_m(\tau), u_m(\tau)\rangle = 1$ にかけてわかるとおり，$O(1/T)$ の実数である．(6.3.4) を運動方程式に入れ $u_n(\tau)$ との内積をつくれば

$$\frac{dc_n(\tau\,;T)}{d\tau} = -\sum_{m\neq n}\left\langle u_n(\tau), \frac{du_m(\tau)}{d\tau}\right\rangle c_m(\tau\,;T)e^{-iT\int_0^\tau[\omega_m(\sigma)-\omega_n(\sigma)]d\sigma}. \tag{6.3.6}$$

c_m がたしかに T によることは，それがこの方程式にあらわに出ていることからわかる．この T は $\to\infty$ で方程式の右辺を激しく振動させるだろう．(6.3.5) に右辺第 2 項をつけたおかげで (6.3.6) に対角項 $m=n$ がないことに着目し，ある

定数$\Omega>0$をとり

[仮定 2] $m \neq n$ ならば $|E_m(\tau)-E_n(\tau)| > \hbar\Omega$

を加えて，その振動を保証しておこう．ω_mはE_mと(6.3.5)の右辺第2項の分だけちがうが，十分に大きなTでは$|\omega_m-\omega_n|>\Omega$となる．また，(6.3.6)で

$$-\left\langle u_n, \frac{\partial u_m}{\partial \tau}\right\rangle = \frac{1}{E_n-E_m}\left\langle u_n, \frac{\partial H}{\partial \tau}u_m\right\rangle \qquad (n \neq m)$$

が成り立つ．これは(6.3.1)をτで微分すれば得られる．そこで，(6.3.6)を

$$\frac{dc_n(\tau\,;T)}{d\tau} = \sum_m P_{nm}(\tau\,;T)c_m(\tau\,;T) \tag{6.3.7}$$

と書くとき，行列Pの対角要素は

$$P_{nn}(\tau\,;T)=0$$

非対角要素は

$$P_{nm}(\tau\,;T) = \frac{1}{E_n(\tau)-E_m(\tau)}\left\langle u_n(\tau), \frac{\partial H(\tau)}{\partial \tau}u_m(\tau)\right\rangle e^{-iT\int_0^\tau[\omega_m(\sigma)-\omega_n(\sigma)]d\sigma}.$$

これを仮に$F_{nm}(\tau)e^{-iT\varphi(\tau)}$とおけば，[仮定 1]から

$$|F_{nm}(\tau)| = |P_{nm}(\tau\,;T)| \leqq M_{nm}. \tag{6.3.8}$$

さらに，もし

[仮定 3] $F_{nm}(\tau)/\dot{\varphi}(\tau)$は区間$[0,1]$で断片的に単調．そして単調な部分区間の数は$N_1$；ただし$\dot{\varphi}\equiv d\varphi/d\tau$

を加えれば，そのような部分区間の1つ$[a,b]$に対し積分の第2平均値定理から$a<\xi<b$なるξが存在して

$$\mathrm{Re}\int_0^\tau P_{nm}(\tau'\,;T)\,d\tau' = \frac{F_{nm}(0)}{\dot{\varphi}(0)}\int_0^\xi \dot{\varphi}(\tau')\cos\{T\varphi(\tau')\}\,d\tau'$$
$$+\frac{F_{nm}(\tau)}{\dot{\varphi}(\tau)}\int_\xi^\tau \dot{\varphi}(\tau')\cos\{T\varphi(\tau')\}\,d\tau'$$

となるので$|\dot{\varphi}(\tau)|>\Omega$から

$$\left|\mathrm{Re}\int_0^\tau P_{nm}(\tau'\,;T)\,d\tau'\right| \leqq \frac{2M_{nm}}{\Omega}\frac{1}{T}.$$

対応する虚数部についても同じ評価ができ，こうした区間がN_1個だから

$$\left|\int_0^\tau P_{nm}(\tau'\,;T)\,d\tau'\right| \leqq \frac{4N_1M_{nm}}{\Omega}\frac{1}{T}. \tag{6.3.9}$$

(6. 3. 8), (6. 3. 9)の知識をつかって微分方程式(6. 3. 7)の解をしらべよう．初期条件は $c_n(0\,;T)=\delta_{nj}$ である．この方程式の解は逐次近似法により(4. 5. 30)に相当する形

$$c_n(\tau\,;T)=\delta_{nj}+\sum_{s=1}^{\infty}\int_0^{\tau}d\tau_s\int_0^{\tau_s}d\tau_{s-1}\cdots\int_0^{\tau_2}d\tau_1[P(\tau_s)P(\tau_{s-1})\cdots P(\tau_1)]_{nj}$$

に求められる．これを(6. 3. 7)に代入して解になっていることを確かめてもよい．ここで，行列 P のパラメーター T を省略し，行列の積の (n, j) 要素を $[\cdots]_{nj}$ と表した．

この多重積分のうち τ_1 に関するものを(6. 3. 9)によって評価し，残りの積分は(6. 3. 8)によって評価すれば，

$$|c_n(\tau\,;T)-\delta_{nj}|\leqq\frac{1}{T}\frac{4N_1}{\Omega}\sum_{s=1}^{\infty}\frac{\tau^{s-1}}{(s-1)\,!}[M^s]_{nj}$$

すなわち

$$|c_n(\tau\,;T)-\delta_{nj}|<\frac{1}{T}\cdot\frac{4N_1}{\Omega}[Me^{M\tau}]_{nj}. \qquad (6. 3. 10)$$

これで望みの(6. 3. 3)が証明された．

しかし，［仮定 2］は強すぎるだろう．これを次のものにかえても証明の大筋は変わらない(［梅沢］, p. 254 を参照)：

［仮定 2′］　(6. 3. 5)の $\omega_m(\tau)$ に対し $\omega_m(\tau)-\omega_n(\tau)$ は $0\leqq\tau\leqq1$ に N_2 個の零点 τ_ρ をもつ．それらは高々 l 位であって，それぞれの近傍で

$$|\omega_m(\tau)-\omega_n(\tau)|>|\tau-\tau_\rho|^l A$$

が成り立つ．

この仮定をとると(6. 3. 10)は多少弱まる：

$$|c_n(\tau\,;T)-\delta_{nj}|<\left(\frac{4A}{T}\right)^{1/(l+1)}\cdot4(N_1+N_2)[Me^{M\tau}]_{nj}. \qquad (6. 3. 11)$$

それにしても，エネルギー準位の一致にもかかわらず遷移は起こらないのである．

$t=T$ でハミルトニアンの変化が止むとすれば，それから後は，(6. 3. 5)で $\hbar\omega_m(\tau)=E_m(\tau)$ となるので，(6. 3. 3)を(6. 3. 4)にもちいて

$$\psi_t=u_j(1)e^{-iE_j(1)t'/\hbar-i\alpha(T)}+O(1/T) \qquad (T\to\infty). \qquad (6. 3. 12)$$

ここに $u_j(1), E_j(1)$ は $\tau=t/T$ で $t=T$ としたときの値であり，$t'=t-T$，そして

$$\alpha(T) \equiv T\int_0^1 \omega_j(\tau)\,d\tau = \frac{T}{\hbar}\int_0^1 E_j(\tau)\,d\tau - i\int_0^1 \left\langle u_j(\tau), \frac{du_j(\tau)}{d\tau}\right\rangle d\tau.$$

たとえば，ハミルトニアンが

$$H = H_0 + \lambda(t/T)H' \tag{6.3.13}$$

の形で $\lambda(0)=0$, $\lambda(1)=1$ であれば，$t=0$ に非摂動ハミルトニアン H_0 の固有状態の 1 つ $u_j(0)=v_j$ から出発して‘ゆっくり’摂動 H' をかけてゆくと結局は $u_j(T)$ として全ハミルトニアン $H=H_0+H'$ の固有状態ができることになる．

この定理が断熱定理とよばれるのは，前期量子論で大きな役割を果たした同名の定理に対応するという歴史的理由にもよるが，相互作用の弱い多粒子系という統計力学的状況のもとで状態が 1 粒子準位への粒子の分布という形をとっているときに，系のパラメーター(たとえば容器の体積)をゆっくり変えて各準位を動かしても，この定理によれば粒子たちはそれぞれの準位にのったままでいることになるというのが，本来の理由であろう(図 6.8 参照)．この過程は系のエントロピーを変えず，まさしく熱力学の意味で断熱過程になっているからである．

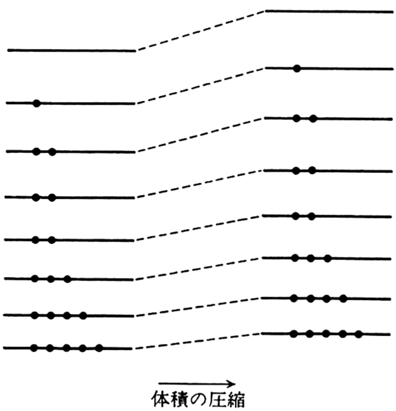


図 6.8 気体の断熱圧縮．各エネルギー準位は一定数の気体粒子をのせたままでエスカレートしてゆく．

b) Born-Oppenheimer 近似

これは初め分子の結合ポテンシャルを導くために考案された．分子は，いくつかの原子核(質量 M_α, 原子番号 Z_α, 位置ベクトル $\boldsymbol{R}_\alpha$; $\alpha=1,2,\cdots,N$) と，いくつかの電子(質量 m, 電荷 $-e$, 位置ベクトル $\boldsymbol{r}_a$; $a=1,2,\cdots,n$) から成る．そのハミルトニアンは

$$H = -\sum_{\alpha} \frac{\hbar^2}{2M_\alpha}\Delta_\alpha - \sum_a \frac{\hbar^2}{2m}\Delta_a - \sum_\alpha\sum_a \frac{Z_\alpha e^2}{|\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{R}_\alpha|}$$
$$+\frac{1}{2}\sum\sum_{\alpha\neq\beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|\boldsymbol{R}_\alpha - \boldsymbol{R}_\beta|} + \frac{1}{2}\sum\sum_{a\neq b}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{r}_b|} \qquad (6.3.14)$$

という形であって，電子と原子核の相互作用を摂動とみなそうとすると，非摂動系は斥力ポテンシャルしか含まず分子とは似ても似つかぬものになってしまう．

原子核は電子より何千倍も重い．電子が走りまわっても原子核はたいして動かないだろう．そこで，原子核は静止しているとする近似が考えられる．これは，いいかえれば(6.3.14)で $M_\alpha \to \infty$ として $-\sum(\hbar^2/2M_\alpha)\Delta_\alpha$ を落とすことだ．そうして得られるハミルトニアン H_0 では，原子核の位置ベクトル $\boldsymbol{R}_\alpha$ は与えられたパラメーターとなり，引力ポテンシャルの項も含めて変数は電子の座標のみとなる．このハミルトニアン H_0 の扱いは格段にやさしくなるはずだろう．これを**静的近似**という．

静的近似における H_0 の固有値 ε は，原子核に対して仮定する配置によるだろう：

$$\varepsilon = \varepsilon(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots, \boldsymbol{R}_N) \qquad (6.3.15)$$

原子核の位置を変えると，ε の値が変わる．事実，分子は原子核の振動や全体としての回転を示すスペクトル線をだす．しかし，もし電子たちが原子核の運動に追随して，刻々の原子核の配置に応じた H_0 の固有状態をなぞっていくならば，(6.3.15)が刻々の分子のエネルギーを与える．これは，原子核の位置変化に応ずるエネルギー変化を(6.3.15)から計算してよいということであって，つまり $\varepsilon(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2, \cdots, \boldsymbol{R}_N)$ が原子核の運動に対するポテンシャルの役目をすることを意味している．さきに0とした原子核の運動エネルギー $-\sum(\hbar^2/2M_\alpha)\Delta_\alpha$ をこれに加えて，原子核の振動スペクトルなどを論じてよいはずである．読者は，すでに，この筋書きが前項の断熱定理の線にそっていることを感じとっておられるだろう．

しかし，ハミルトニアンの固有値問題を解くのは定常状態を見ることであって，前項で扱ったような時間依存性は，ここにはないのである．

Born-Oppenheimer の**断熱近似**は，定常状態に関する断熱定理の定式化を与えるものである．その本質を説明するには(6.3.14)のハミルトニアンは複雑すぎる．いっそ1次元の，x 軸にそう運動を考え

$$H = H_e + H_K \tag{6.3.16}$$

をとろう．ここに

$$H_e = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, X), \qquad H_K = -\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2}. \tag{6.3.17}$$

前者が‘電子’のハミルトニアン，後者が‘核’の運動エネルギーのつもりである．電子や核が複数個あるとしても以下の議論は変わらない．なお，単位系を適当にとって，核の質量 M 以外の余計な係数をなくした．それで V の中にもやたらに大きい係数，小さい係数はなくなっているものとする．X を固定する静的近似で H_e の固有値問題を解けば——$V(x, X)$ は，適当な X の値に対して H_e が束縛状態 $\varphi_n(x;X)$ をもつようなものであると仮定して——エネルギー固有値 $\varepsilon_n(X)$ も波動関数 $\varphi_n(x;X)$ のひろがりも 1 のオーダーになるものとするのである．

しかし，原子核は重いので，平衡位置のまわりに振動をするとしても振幅は 1 よりはるかに小さいだろう．どのくらい小さいかを見るため，仮に上に説明した筋書きが正しいとして，核の運動にたいするハミルトニアンを

$$H_{\text{nucl}} = -\frac{1}{2M}\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{1}{2}\varepsilon''(X_0)(X - X_0)^2$$

とかいてみる．プライム ′ は X に関する微分．X_0 は平衡位置で，$\varepsilon'(X_0) = 0$ である．上の仮定から $\varepsilon''(X_0)$ は 1 のオーダーなので，

$$X = X_0 + \kappa\xi, \qquad \kappa \equiv (1/M)^{1/4} \tag{6.3.18}$$

とおけば ξ が 1 のオーダーになることがわかる．ふつうの単位系にもどしていうと，κ は $(m/M)^{1/4}$，すなわち電子と核の質量比の 4 乗根である．この小さいパラメーターに関する展開を Born-Oppenheimer の近似は利用する．

その説明に入るまえに，いくつか補助的な公式を準備しよう．ある範囲の X に対して固有値問題

$$H_e \varphi_n(x;X) = \varepsilon_n(X)\varphi_n(x;X) \tag{6.3.19}$$

は束縛状態の解をもつとし，他の解もあわせて完全正規直交系が得られているものとする．(6.3.19) を (6.3.18) によって κ で展開すると，

$$H_e^{(0)} \equiv -(1/2)(\partial^2/\partial x^2) + V(x, X_0)$$

とかいて，κ の 0 次，1 次，2 次の項から，それぞれ

$$[H_e^{(0)} - \varepsilon_n(X_0)]\varphi_n(x;X_0) = 0 \tag{6.3.20}$$

$$[H_e^{(0)}-\varepsilon_n(X_0)]\varphi_n'(x\,;X_0)+[V'(x,X_0)-\varepsilon_n'(X_0)]\varphi_n(x\,;X_0)=0 \tag{6.3.21}$$

$$[H_e^{(0)}-\varepsilon_n(X_0)]\varphi_n''(x\,;X_0)+2[V'(x,X_0)-\varepsilon_n'(X_0)]\varphi_n'(x\,;X_0)$$
$$+[V''(x,X_0)-\varepsilon_n''(X_0)]\varphi_n(x\,;X_0)=0. \tag{6.3.22}$$

以下 ε_n, φ_n などと書けば $X=X_0$ の $\varepsilon_n(X_0), \varphi_n(x\,;X_0)$ などを意味するものとする.

(6.3.21) と φ_m の内積——電子の座標についてだけ積分する——をつくると

$$(\varepsilon_m-\varepsilon_n)\langle\varphi_m, \varphi_n'\rangle+\langle\varphi_m, V'\varphi_n\rangle-\varepsilon_n'\delta_{mn}=0. \tag{6.3.23}$$

とくに $m=n$ とおけば

$$\varepsilon_n'=\langle\varphi_n, V'\varphi_n\rangle. \tag{6.3.24}$$

これは，ハミルトニアンのパラメーター微分の固有関数による期待値が期待値の微分に等しいことをいう Feynman の定理の特別の場合になっている.

つぎに，(6.3.22) と φ_m の内積. $m\neq n$ のときには

$$(\varepsilon_m-\varepsilon_n)\langle\varphi_m, \varphi_n''\rangle+2\langle\varphi_m, (V'-\varepsilon_n')\varphi_n'\rangle+\langle\varphi_m, V''\varphi_n\rangle=0. \tag{6.3.25}$$

そして $n=m$ では

$$2\langle\varphi_n, (V'-\varepsilon_n')\varphi_n'\rangle+\langle\varphi_n, V''\varphi_n\rangle-\varepsilon_n''=0. \tag{6.3.26}$$

さて，核の運動もいれた全ハミルトニアンの固有値問題

$$(H_e+H_K-E_\alpha)u_\alpha(x,\xi)=0 \tag{6.3.27}$$

を考えよう. $(n,\nu)\equiv\alpha$ と記す. ここでは (6.3.18) の変数 ξ をつかうので, $H_K=-(\kappa^2/2)(\partial^2/\partial\xi^2)$ である. いま

$$u_\alpha=u_\alpha^{(0)}+\kappa u_\alpha^{(1)}+\cdots$$
$$E_\alpha=E_\alpha^{(0)}+\kappa E_\alpha^{(1)}+\cdots$$

とすれば，(6.3.27) の κ に関するベキ展開の各項から

$$[H_e^{(0)}-E_\alpha^{(0)}]u_\alpha^{(0)}(x,\xi)=0 \tag{6.3.28}$$

$$[H_e^{(0)}-E_\alpha^{(0)}]u_\alpha^{(1)}(x,\xi)+[\xi V'(x,X_0)-E_\alpha^{(1)}]u_\alpha^{(0)}=0 \tag{6.3.29}$$

$$[H_e^{(0)}-E_\alpha^{(0)}]u_\alpha^{(2)}(x,\xi)+[\xi V'(x,X_0)-E_\alpha^{(1)}]u_\alpha^{(1)}$$
$$+\left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{1}{2}\xi^2V''(x,X_0)-E_\alpha^{(2)}\right]u_\alpha^{(0)}=0. \tag{6.3.30}$$

核の運動エネルギーが第2近似でやっとでてくることに注意しよう. 第0近似 (6.3.28) では (6.3.20) から

$$u_\alpha^{(0)}(x,\xi)=\varphi_n(x\,;X_0)\chi_\nu^{(0)}(\xi), \qquad E_\alpha^{(0)}=\varepsilon_n(X_0) \tag{6.3.31}$$

とおくことができる．ただし $\chi_\nu^{(0)}$ は未定で，量子数 ν のたちもまだわからない．

(6.3.29) と φ_m の内積をつくると，

$$(\varepsilon_m-\varepsilon_n)\langle\varphi_m, u_\alpha^{(1)}(\cdot,\xi)\rangle+\langle\varphi_m, [\xi V'-E_\alpha^{(1)}]\varphi_n\rangle\chi_\nu^{(0)}(\xi)=0. \quad (6.3.32)$$

内積をとるとき $u_\alpha^{(1)}$ の変数 x は積分されてしまうので・印に変えた．この式が $m=n$ で成り立つためには，ξ が変数だから

$$\langle\varphi_n, V'(\cdot, X_0)\varphi_n\rangle=0, \qquad E_\alpha^{(1)}=0$$

でなければならない．これは (6.3.24) によれば

$$\varepsilon_n'=[\partial\varepsilon_n(X)/\partial X]_{X=X_0}=0 \quad (6.3.33)$$

をも意味している．こうして X_0 を定める条件(平衡条件)が得られた．$m\neq n$ の (6.3.32) を (6.3.23) と比較すれば

$$u_\alpha^{(1)}(x,\xi)=\xi\varphi_n'(x;X_0)\chi_\nu^{(0)}(\xi)+\varphi_n(x;X_0)\chi_\nu^{(1)}(\xi) \quad (6.3.34)$$

が知れる．ただし，$\chi_\nu^{(1)}$ は $\chi_\nu^{(0)}$ とともに未定である．

つぎに (6.3.30) と φ_m の内積をつくる．$m=n$ なら

$$\langle\varphi_n, \xi V' u_\alpha^{(1)}(\cdot,\xi)\rangle+\left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{1}{2}\xi^2\langle\varphi_n, V''\varphi_n\rangle-E_\alpha^{(2)}\right]\chi_\nu^{(0)}(\xi)=0.$$

この式の V', V'' の項は，(6.3.26) に (6.3.34) を考慮すれば ε_n'' にまとまり

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{1}{2}\frac{\partial^2\varepsilon_n}{\partial X_0^2}\xi^2-E_\alpha^{(2)}\right]\chi_\nu^{(0)}(\xi)=0. \quad (6.3.35)$$

これは核の変位 ξ が調和振動することを示す．もちろん

$$\partial^2\varepsilon_n/\partial X_0^2>0 \quad (6.3.36)$$

と仮定してのことである．ここに $\partial^2\varepsilon_n/\partial X_0^2$ は $[\partial^2\varepsilon_n(X)/\partial X^2]_{X=X_0}$ を意味する．$\varepsilon_n(X)$ が (6.3.33), (6.3.36) を満たす極小をもたない場合は，いまの近似法は役に立たない．(6.3.18) の ξ による展開が意味をなさなくなるからである．極小がある場合には，(6.3.35) の結果からみて，静的近似 (6.3.19) における電子のエネルギー固有値 $\varepsilon_n(X)$ が予想どおり核の運動にたいするポテンシャルの役を果たすといえるだろう．いま計算した2次までの近似では

$$\varepsilon_n(X)=\varepsilon_n(X_0)+\frac{1}{2}\frac{\partial^2\varepsilon_n}{\partial X_0^2}\xi^2, \qquad \frac{\partial\varepsilon_n}{\partial X_0}=0 \quad (6.3.37)$$

が，たしかにポテンシャルの役をしている．さらに近似を上げれば，振動には非調和性が現れる．それに加えて断熱的運動の描像からのずれも現れることになる

だろう.

断熱定理からの予想は，固有関数 u_α を求めてみると，さらにドラマティックに裏書きされる. (6. 3. 30) と φ_m の内積 $(m\neq n)$ を (6. 3. 25) に比較して

$$u_\alpha{}^{(2)}(x,\xi)=\frac{1}{2}\xi^2\varphi_n{}''(x;X_0)\chi_\nu{}^{(0)}(\xi)$$
$$+\xi\varphi_n{}'(x,X_0)\chi_\nu{}^{(1)}(\xi)+\varphi_n(x;X_0)\chi_\nu{}^{(2)}(\xi). \qquad (6.3.38)$$

ただし，$\chi_\nu{}^{(2)}$ は未定である. 第0近似 (6. 3. 31) および第1近似の補正 (6. 3. 47) と合わせると，核と電子の全系の波動関数が，

$$u_\alpha(x;X)=\varphi_n(x;X_0+\kappa\xi)\chi_\nu(\xi)+O(\kappa^3) \qquad (6.3.39)$$

となる. ここに

$$\chi_\nu(\xi)=\chi_\nu{}^{(0)}(\xi)+\kappa\chi_\nu{}^{(1)}(\xi)+\kappa^2\chi_\nu{}^{(2)}(\xi). \qquad (6.3.40)$$

電子の波動関数が，静的近似における $\varphi_n(x;X_0)$ の X_0 を動いている核の真の座標 $X=X_0+\kappa\xi$ に変えるだけの形にまとまったことに注意しよう. これは，電子が実際に核の刻々の位置に応じた固有状態をなぞってゆくことを示す. そんな時間変化は (6. 3. 39) に含まれていないという読者があれば，電子の存在確率を考えてみるとよい. 電子が点 x の近傍 dx に，核が $X=X_0+\kappa\xi$ の近傍 dX に見出される確率は，(6. 3. 39) によると，核についての $|\chi_\nu(\xi)|^2dX$ と '核が点 X に静止しているとしたとき' 電子が x にくる確率 $|\varphi_n(x;X_0+\kappa\xi)|^2dx$ との積になっているではないか.

この断熱的運動の描像は κ の何次で破れるだろうか？

Born と Oppenheimer は，分子の例で κ の4次まで近似を進め，分子の振動と回転まで含めて電子がよくこれに追随することを示した. 上の計算でも振動は κ の2次の近似まで定まらなかったが，分子の回転は4次の近似ではじめて入ってくるのであった.

第7章　量子力学と相対論

これまで用いてきたSchrödingerの波動方程式は，相対性原理にそぐわない．たとえば，質量mの粒子が運動量$\boldsymbol{p}$で走るときの運動エネルギーとして，それは$\boldsymbol{p}^2/2m$を与えるが，相対論的には，これは$\sqrt{\boldsymbol{p}^2c^2+m^2c^4}-mc^2$でなければならないのだ．

相対性原理にかなうように波動方程式をなおすことはできないものだろうか？それをするには量子力学の変更が必要になるだろうか？　(第1章では相対論的な形の(*1. 8. 20*)をわざわざ非相対論的に近似してから用いることにした．なぜなのか？)

§7.1　Lorentz変換

a)　ベクトル，テンソル

相対性原理は，本講座第2巻『古典物理学II』に述べられているとおり，物理の基礎方程式がLorentz変換に対して共変なことを要求する．その意味は，つぎのようなものであった．

まず，Lorentz変換というのは，時空座標系x^μ($x^0\equiv ct$, $x^1\equiv x$, $x^2\equiv y$, $x^3\equiv z$)の実1次変換†

$$x^\mu \longmapsto x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu \tag{7.1.1}$$

であって，どんなx^μに対しても

$$g_{\mu\nu}x'^\mu x'^\nu = g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu \tag{7.1.2}$$

の条件を満たすものをいう．ただし，$g_{\mu\nu}$はμを行，νを列の番号として行列に書けば

---

† この章では，ギリシャ文字の添字は0, 1, 2, 3を動き，ローマ字なら1, 2, 3を動くものとし，1つの項に同じ添字が2度あるときには，とくに断わらない限り，それらの添字の動く範囲にわたって和をとる．また$\{x^\mu\}_{\mu=0,\cdots,3}$と書くべきところを$x^\mu$と略記する．また§7.3までは複素共役を$^-$で表す．

$$
[g_{\mu\nu}] = \begin{array}{c|cccc} \mu\backslash\nu & 0 & 1 & 2 & 3 \\ \hline 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{array}. \tag{7.1.3}
$$

条件(7.1.2)を，1次変換(7.1.1)が2次形式 $g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu$ を不変にするといい表す．$g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu$ が**不変量**であるともいう．添字の上げ下げを $x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu$，$x^\mu = g^{\mu\nu}x_\nu$ で定義して，$g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu$ を $x_\mu x^\mu$ と書くことも多い．ここに行列として $[g^{\mu\nu}] = [g_{\mu\nu}]$ であり，Kronecker のデルタを g^μ_λ と書けば

$$
g^{\mu\nu}g_{\nu\lambda} = g^\mu_\lambda. \tag{7.1.4}
$$

Lorentz 変換の例としては，x^3 軸の正の向きに速さ v で動く座標系への変換

$$
[\Lambda^\mu{}_\nu(v)] = \begin{array}{c|cccc} \mu\backslash\nu & 0 & 1 & 2 & 3 \\ \hline 0 & \cosh\chi & 0 & 0 & -\sinh\chi \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & -\sinh\chi & 0 & 0 & \cosh\chi \end{array} \quad \left(\tanh\chi \equiv \frac{v}{c}\right) \tag{7.1.5}
$$

が典型的である(図 7.1)．これとならんで座標系の単なる回転も Lorentz 変換に含まれる．x^2 軸まわりの角 β の回転，x^3 軸まわりの角 γ の回転(図 7.2)に対して，変換行列はそれぞれ

$$
[\Lambda^\mu{}_\nu(\beta)] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\beta & 0 & -\sin\beta \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \sin\beta & 0 & \cos\beta \end{bmatrix}, \quad [\Lambda^\mu{}_\nu(\gamma)] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\gamma & \sin\gamma & 0 \\ 0 & -\sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \tag{7.1.6}
$$

さらに，空間座標軸の反転，時間座標軸の反転も Lorentz 変換である．それぞれをとくに $P^\mu{}_\nu$, $T^\mu{}_\nu$ で表せば

$$
[P^\mu{}_\nu] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad [T^\mu{}_\nu] = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{7.1.7}
$$

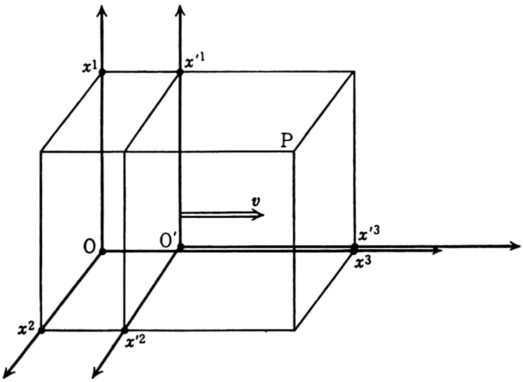


図 7.1 動く座標系への変換

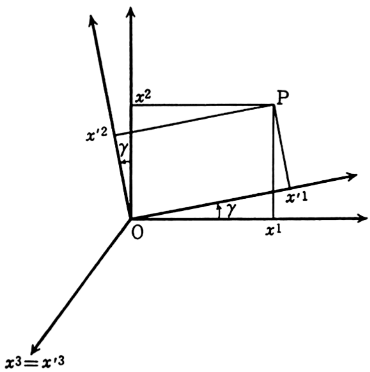


図 7.2 x^3 軸まわりの座標系の回転. 見やすいように点 P が x^1x^2 平面上にある場合を描いた

空間反転, 時間反転の行列の行列式は -1, その他の行列の行列式は $+1$ であることに注意しよう. 一般に, $\det[\Lambda^{\mu}{}_{\nu}]=+1$ で時間の向きを変えない($\Lambda^0{}_0>0$, 実は $\geqq 1$ となることが証明される) Lorentz 変換を**固有 Lorentz 変換**という. どんな固有 Lorentz 変換も (*7.1.5*), (*7.1.6*) の適当な積で表せる.

Lorentz 変換の全体 G は群をなす. そのなかで固有 Lorentz 変換の全体 $G_{\uparrow}{}^{+}$ は正規部分群をなし(固有 Lorentz 群), また, $\det[\Lambda^{\mu}{}_{\nu}]$ の符号は問わず $\Lambda^0{}_0\geqq 1$ なる変換の全体 $G_{\uparrow}$ としても正規部分群になる(順時的 Lorentz 群).

Lorentz 変換の条件 (*7.1.2*) は

$$\Lambda^{\mu}{}_{\rho}g_{\mu\nu}\Lambda^{\nu}{}_{\sigma}=g_{\rho\sigma} \qquad (7.1.8)$$

と同値である．これを行列の関係として ${}^t\Lambda g\Lambda=g$ とよむことができ(肩符 t は転置行列を表す)，$(\det\Lambda)^2=1$ が知れる．ただし，行列要素は添字の上げ下げによって変わるので，単に Λ などと書くのは危険であり，やはり上に g に対してしたのと同様に $[\Lambda^\mu{}_\nu]$ とするほうがよい．実際，(7.1.8) は $\Lambda^\mu{}_\rho\Lambda_{\mu\sigma}=g_{\rho\sigma}$ と書き直され，$g^{\sigma\lambda}$ をかければ

$$\Lambda^\mu{}_\rho\Lambda_\mu{}^\lambda = g^\lambda_\rho \tag{7.1.9}$$

の形にもなる．$\Lambda_\mu{}^\lambda$ は，λ か μ のどちらか一方が0の場合 $-\Lambda^\mu{}_\lambda$ に等しく，その他の場合には $\Lambda^\mu{}_\lambda$ に等しい．

(7.1.1) は，$\det\Lambda\neq 0$ だから逆に解くことができる．その結果を

$$x^\nu = (\Lambda^{-1})^\nu{}_\rho x'^\rho \tag{7.1.10}$$

と書こう．この変換行列は $[\Lambda^\mu{}_\nu]$ の逆行列であって

$$\Lambda^\mu{}_\nu(\Lambda^{-1})^\nu{}_\rho = g^\mu_\rho. \tag{7.1.11}$$

これに $\Lambda_\mu{}^\sigma$ をかけて (7.1.9) を用いれば

$$(\Lambda^{-1})^\sigma{}_\rho = \Lambda_\rho{}^\sigma \tag{7.1.12}$$

が知れ，(7.1.10) は

$$x^\nu = \Lambda_\rho{}^\nu x'^\rho \tag{7.1.13}$$

と書けることになる．(7.1.11) とならんで $(\Lambda^{-1})^\nu{}_\rho\Lambda^\rho{}_\sigma=g^\nu_\sigma$ も成り立つ．

変換 (7.1.1) をすると，微分演算子 $\partial_\mu\equiv\partial/\partial x^\mu$ は

$$\partial'_\rho = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\rho}\frac{\partial}{\partial x^\nu} = \Lambda_\rho{}^\nu\partial_\nu \tag{7.1.14}$$

に変わる．この式から ∂_μ の添字を下につけた理由は明らかであろう．

一般に，変換 (7.1.1) にともなって $A'^\mu=\Lambda^\mu{}_\rho A^\rho$ のように変換する量 A^ρ を**反変ベクトル**とよび，$B'_\mu=\Lambda_\mu{}^\lambda B_\lambda$ のように変換する量 B_λ を**共変ベクトル**とよぶ†．(7.1.9) から $A'^\mu B'_\mu=A^\lambda B_\lambda$ が知れる．このように座標変換しても変わらない量を**スカラー**という．

もし，2つの添字をもつ $T^{\mu\nu}$ といった量が，座標の変換 (7.1.1) にともない

$$T'^{\mu\nu} = \Lambda^\mu{}_\rho\Lambda^\nu{}_\lambda T^{\rho\lambda}$$

のように変換するなら，これを2階の**反変テンソル**とよぶ．より高階の反変テンソルの定義および共変テンソルの定義は，あらためて記すまでもあるまい．$T^\mu{}_\nu$

† ‘変換される’と受身形にするのが本来であるが，能動形が慣用になった．

のようなものは混合テンソルという．ベクトルおよびスカラーは，それぞれ 1 階，0 階のテンソルとみられる．

$g_{\mu\nu}$ は，どの座標系でも共通に(7.1.3)で定義するが，(7.1.8)によれば，このことを $g_{\mu\nu}$ が 2 階の共変テンソルであると言い表すことができる．(7.1.9)は，$\Lambda^{\mu}{}_{\rho}\Lambda_{\nu}{}^{\lambda}g^{\nu}_{\mu}=g^{\lambda}_{\rho}$ と書けば，Kronecker のデルタが 2 階の混合テンソルであることを示す．

b) 場の量の変換，Klein-Gordon の方程式

時空の点 P の関数 $\Psi^{\mu\nu}(\mathrm{P})$ があって，座標系の変換(7.1.1)にともない

$$\Psi'^{\mu\nu}(\mathrm{P}) = \Lambda^{\mu}{}_{\rho}\Lambda^{\nu}{}_{\lambda}\Psi^{\rho\lambda}(\mathrm{P}) \tag{7.1.15}$$

のように変換するなら，これを 2 階の**反変テンソル場**とよぶ．同一の時空点 P の座標が，一方の座標系では座標 x^{ν} で，他方の座標系では x'^{μ} で表されるというのが変換(7.1.1)の意味であるから，上の定義は

$$\Psi'^{\mu\nu}(x') = \Lambda^{\mu}{}_{\rho}\Lambda^{\nu}{}_{\sigma}\Psi^{\rho\sigma}(\Lambda^{-1}x') \tag{7.1.16}$$

を意味している．$\Lambda^{-1}x'$ は，x' の成分を x'^{λ} とするとき，$(\Lambda^{-1})^{\tau}{}_{\lambda}x'^{\lambda}$ を成分とする座標を表す．一般のテンソル場も同様に定義される．

さて，任意の数のスカラー $a, \cdots$，ベクトル $f^{\mu}, \cdots$，テンソル $h^{\rho\sigma}, \cdots$ を含む方程式 $F(a, \cdots, f^{\mu}, \cdots, h^{\rho\sigma}, \cdots)=0$ が**共変的**であるとは，Lorentz 変換(7.1.1)をしても同じ形 $F(a, \cdots, f'^{\mu}, \cdots, h'^{\rho\sigma}, \cdots)=0$ が成り立つことをいう．

スカラー場 Φ に対する **Klein-Gordon の方程式**

$$[\partial_{\mu}\partial^{\mu}+(mc/\hbar)^2]\Phi = 0 \tag{7.1.17}$$

は共変な方程式の例である．ただし，m は質量の次元をもつスカラー定数．この方程式は，ていねいに書けば

$$\left[\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\Phi = 0$$

であって，

$$E^2 = \boldsymbol{p}^2c^2+m^2c^4 \tag{7.1.18}$$

を満たす任意の実定数 E，$\boldsymbol{p}=(p_x, p_y, p_z)$ に対し

$$\Phi = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\right], \qquad \boldsymbol{r} \equiv (x, y, z)$$

を解にもつ．これは，(7.1.18)がエネルギー E，運動量 $\boldsymbol{p}$ の相対論的な関係式

であるから，自由粒子の状態を表すと解釈したくなるだろう．

しかし，(7.1.17)を Schrödinger 方程式に代わるものとして採用することはできない．まず，(7.1.17)は $E=-\sqrt{\boldsymbol{p}^2c^2+m^2c^4}$ という負エネルギーの場合を許すが，これに応ずる解は物理的解釈をもたない．だからといって，負エネルギーの解を排除しておくことは，時間的に変化する摂動の加わる場合を考えればわかるように，一般には不可能である．仮に，負エネルギーの解になにかの解釈がつけられたとしても，そのときには $|\Phi(\boldsymbol{r},t)|^2$ を粒子の存在確率密度とする量子力学の解釈が維持できない．なぜなら，負エネルギーの解をも含む波束

$$\Phi(\boldsymbol{r},t)=\int d^3\boldsymbol{p}[a_+(\boldsymbol{p})e^{-\frac{i}{\hbar}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})}+a_-(\boldsymbol{p})e^{-\frac{i}{\hbar}(-E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})}]$$

$$(E_p\equiv\sqrt{\boldsymbol{p}^2c^2+m^2c^4})$$

に対しては，全確率の保存

$$\int_{\text{全空間}}|\Phi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3\boldsymbol{r}=t\ \text{に無関係} \qquad (7.1.19)$$

がもはや成り立たないからである．

われわれは，量子力学の変更は考えないで，Schrödinger 方程式にとって代わるべき相対論的に共変な方程式を別にさがすことにしよう．これが 1920 年代も終りの頃に Dirac が自らに課した問題である．われわれは，しかし，Dirac とはすこしちがった推論の道をたどることにしたい．

§7.2 スピノル

a) 固有 Lorentz 群の表現

いま 2 行 2 列の行列 A をとって，$X'=A^\dagger XA$，すなわち

$$\begin{bmatrix} ct'+z' & x'-iy' \\ x'+iy' & ct'-z' \end{bmatrix}=A^\dagger\begin{bmatrix} ct+z & x-iy \\ x+iy & ct-z \end{bmatrix}A \qquad (7.2.1)$$

とおけば($\dagger$ は Hermite 共役)，これは座標の実 1 次変換をひきおこす．実の変換であることは，座標からつくった行列 X の Hermite 性が保存されることからわかる．さらに，

$$\det\begin{bmatrix} ct+z & x-iy \\ x+iy & ct-z \end{bmatrix}=g_{\mu\nu}x^\mu x^\nu$$

に注意して(7.2.1)の両辺の行列式をとればわかるように

$$\det A = 1 \tag{7.2.2}$$

なら座標変換(7.2.1)は(7.1.2)の条件を満たしLorentz変換になる．(7.2.2)に従う行列はユニモジュラ(unimodular)であるという．ユニモジュラな行列による変換(7.2.1)は明らかに群をなすので，これを$SL(2, \mathrm{C})$とよぶ．Aの行列要素を実数に限って得る部分群を$SL(2, \mathrm{R})$とよぶ．

とくに，Aとして

$$A(v) = \pm\begin{bmatrix} e^{-\chi/2} & 0 \\ 0 & e^{\chi/2} \end{bmatrix} \qquad \left(\tanh\chi \equiv \frac{v}{c}\right) \tag{7.2.3}$$

をとれば，$z = x^3$軸の正の向きに速さvで動く座標系へのLorentz変換(7.1.5)が得られ，また

$$A(\beta) = \pm\begin{bmatrix} \cos\dfrac{\beta}{2} & \sin\dfrac{\beta}{2} \\ -\sin\dfrac{\beta}{2} & \cos\dfrac{\beta}{2} \end{bmatrix}, \qquad A(\gamma) = \pm\begin{bmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{bmatrix} \tag{7.2.4}$$

にとれば，それぞれ(7.1.6)の座標系の回転$[\Lambda^{\mu}{}_{\nu}(\beta)]$，$[\Lambda^{\mu}{}_{\nu}(\gamma)]$が得られる．このことを確かめるのには，(7.2.1)の行列Xが単位行列σ_0とPauliの行列$\boldsymbol{\sigma}$の組

$$\sigma_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

を用いて

$$X = x^{\mu}\sigma_{\mu} \tag{7.2.5}$$

と書けることに注目し，まず$A^{\dagger}\sigma_{\mu}A$を計算するのが便利である．計算の結果は上のどの場合にも，各Aに対応するΛ行列でもって

$$A^{\dagger}\sigma_{\mu}A = \Lambda^{\nu}{}_{\mu}\sigma_{\nu} \tag{7.2.6}$$

と表され，つまり(7.2.1)はσ_{μ}の世界に共変ベクトルの変換をひきおこすので，これと(7.2.5)で結ばれたx^{μ}は望みどおりの反変ベクトルの変換をすることがわかる．

どんな固有Lorentz変換も(7.1.5)，(7.1.6)の適当な積で表されるのだったから，変換(7.2.1)は固有Lorentz群を完全にカバーしている．では，それ以上のものは含まれていないか？

(7.2.1) が Lorentz 変換をひきおこすことは最初に述べた．(7.2.5) に注意して $X'=A^\dagger[x^\mu\sigma_\mu]A$ の両辺のトレースをとると†

$$2x'^0 = x^0\,\mathrm{tr}\,[A^\dagger A]+x^k\,\mathrm{tr}\,[A^\dagger\sigma_k A] \tag{7.2.7}$$

となる．$\mathrm{tr}\,[A^\dagger A]$ は正だから

$$\Lambda^0{}_0 > 0. \tag{7.2.8}$$

そこで

$$\det\,[\Lambda^\nu{}_\mu] = 1 \tag{7.2.9}$$

を示せば (7.2.1) のひきおこす変換は固有 Lorentz 変換にかぎることがいえる．

(7.2.9) の証明には，任意の正則行列 A が，U をユニタリー行列，P を正値 Hermite 行列として $A=UP$ の形に分解されること (極表示) をつかう．U と P に対する (7.2.6) を

$$U^\dagger\sigma_\mu U = \Lambda(U)^\nu{}_\mu\sigma_\nu, \qquad P^\dagger\sigma_\nu P = \Lambda(P)^\rho{}_\nu\sigma_\rho$$

とすれば

$$P^\dagger U^\dagger\sigma_\mu UP = \Lambda(U)^\nu{}_\mu\Lambda(P)^\rho{}_\nu\sigma_\rho$$

となるので

$$\Lambda(UP)^\rho{}_\mu = \Lambda(U)^\nu{}_\mu\Lambda(P)^\rho{}_\nu. \tag{7.2.10}$$

そこで $\det\,[\Lambda(U)^\nu{}_\mu]$，$\det\,[\Lambda(P)^\rho{}_\nu]$ がそれぞれ 1 に等しいことを証明する．

まず，$\Lambda(U)^\nu{}_\mu$ はユニモジュラかつユニタリーな行列 U が (7.2.1) によってひきおこす変換というわけだが，これが座標系の空間部分の回転であることを示そう．そのことから直ちに $\det\,[\Lambda(U)^\nu{}_\mu]=1$ がでる．(7.2.7) で $A=U$ とすると，U のユニタリー性により

$$\mathrm{tr}\,[U^\dagger\sigma_k U] = \mathrm{tr}\,[UU^\dagger\sigma_k] = \mathrm{tr}\,\sigma_k = 0$$

だから $x'^0=x^0$，すなわち $\Lambda^\mu{}_\nu(U)$ は時間を変えない．$\Lambda^0{}_k(U)=0$，$\Lambda^0{}_0(U)=1$. このとき，とくに $(x^\nu)=(ct,0,0,0)$ の変換を考えれば，Lorentz 変換の条件 (7.1.2) から，$\Lambda^k{}_0(U)=0$ でもあることが知れる．行列 $[\Lambda^\mu{}_\nu(U)]$ は，したがって

$$[\Lambda^\mu{}_\nu(U)] = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \Lambda^k{}_l\end{bmatrix} \tag{7.2.11}$$

† 最初に約束したとおり，ローマ字の添字は 1, 2, 3 のみを動く．

の形であり，$\det[\Lambda^k{}_l]=1$ を示せば，これが空間回転であることがいえる．ところが，(7.2.6)から，U のユニタリー性により

$$U^\dagger\sigma_1\sigma_2\sigma_3U = \Lambda^l{}_1\Lambda^m{}_2\Lambda^n{}_3\sigma_l\sigma_m\sigma_n.$$

この両辺に右から $\sigma_3\sigma_2\sigma_1$ を掛けてトレースをとると，$\sigma_1\sigma_2\sigma_3=-\sigma_3\sigma_2\sigma_1=i$ なので左辺は $\mathrm{tr}[U^\dagger U]=2$ を与える．他方，右辺は，反交換関係 $\{\sigma_i,\sigma_j\}=2\delta_{ij}$ をくりかえし用いて得られる

$$\mathrm{tr}[\sigma_l\sigma_m\sigma_n\sigma_3\sigma_2\sigma_1] = 2\varepsilon_{lmn}$$

のため $2\det[\Lambda^l{}_k]$ を与える．こうして $\det[\Lambda^l{}_k]=1$ がいえた．ここに，ε_{lmn} は (l,m,n) が $(1,2,3)$ の偶置換のとき 1，奇置換なら -1，その他の場合は 0 という値をとる Levi Civita の記号である．

つぎに $\Lambda(P)^\rho{}_\nu$ であるが，P は正値 Hermite 行列なので，あるユニタリー変換 V で対角化でき，対角形がまた正値だから，(7.2.3)を用いて $P=V^\dagger A(v)V$ と書けることになる．そこで $\Lambda(V^\dagger A(v)V)^\rho{}_\nu$ を(7.2.10)にならって分解すれば，ユニタリーな V には上の結果が適用され $\det[\Lambda(P)^\rho{}_\nu]=\det[\Lambda(A(v))^\sigma{}_\mu]$．ところが，この右辺は(7.1.5)から計算され 1 に等しい．

こうして(7.2.9)が証明された．証明の途中で，任意の固有 Lorentz 変換が動く座標系への変換(7.1.5)と空間回転の積で表されることが再確認されている．

(7.2.2)を満たす $SL(2,\mathbb{C})$ の行列には(7.2.1)により固有 Lorentz 群 $G^+{}_\uparrow$ の変換が対応するというのが上の証明の結論である．この対応は，さらに“積を保存する”．すなわち，$A,B\in SL(2,\mathbb{C})$ に $\Lambda(A),\Lambda(B)\in G^+{}_\uparrow$ がそれぞれ対応するならば(Λ の添字は省略)，$SL(2,\mathbb{C})$ の世界での積 AB に $G^+{}_\uparrow$ での積 $\Lambda(A)\Lambda(B)$ が対応する．実際，(7.2.10)を得たのと同様にして

$$\Lambda(AB) = \Lambda(A)\Lambda(B) \tag{7.2.12}$$

が得られるのである．以上 2 つの事実をまとめて，“$G^+{}_\uparrow$ は $SL(2,\mathbb{C})$ の表現である”と言い表すのであった(第 8 章を参照)．しかし，すでに(7.2.3)，(7.2.4)から明らかなとおり $G^+{}_\uparrow$ から $SL(2,\mathbb{C})$ への対応は多価なので“$SL(2,\mathbb{C})$ は $G^+{}_\uparrow$ の表現である”とはいえない．次に示すとおり，この向きの対応は 2 価であるから“$SL(2,\mathbb{C})$ は固有 Lorentz 群の 2 価表現である”という．実際，$A_1,A_2\in SL(2,\mathbb{C})$ が同一の $\Lambda\in G^+{}_\uparrow$ に対応したとすると(7.2.12)から $\Lambda(A_1A_2{}^{-1})$ は恒等変換となり，(7.2.1)から $A_1A_2{}^{-1}$ は任意の Hermite 行列 X と可換でなければならない．

つまり Pauli 行列 σ_k と可換だから $A_1A_2^{-1}$ は単位行列 I の定数倍. よってユニモジュラ性から $A_1A_2^{-1}=\pm I$ となり, $A_1=\pm A_2$. 逆に, このような A_1, A_2 が同一の Lorentz 変換を与えることは明らかである.

b) van der Waerden のスピノル

行列 $A^\dagger \in SL(2,\mathbb{C})$ によって

$$\begin{bmatrix}\xi_{1'}\\ \xi_{2'}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix},\qquad A^\dagger\equiv\begin{bmatrix}\alpha & \beta\\ \gamma & \delta\end{bmatrix} \tag{7.2.13}$$

のように変換される2次元複素ベクトルを van der Waerden の**共変スピノル**という. これと複素共役な $\begin{bmatrix}\bar{\xi}_1\\ \bar{\xi}_2\end{bmatrix}$ も, $A^\dagger$ の複素共役 $\overline{A^\dagger}$ がユニモジュラだからスピノルであるが, これと同じ変換をする量には添字の上に点をつけて前者との特別な関係を明示する:

$$\begin{bmatrix}\eta'_{\dot{1}}\\ \eta'_{\dot{2}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\bar{\alpha} & \bar{\beta}\\ \bar{\gamma} & \bar{\delta}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\eta_{\dot{1}}\\ \eta_{\dot{2}}\end{bmatrix}. \tag{7.2.14}$$

このそれぞれに対して,

$$\begin{bmatrix}\xi^1\\ \xi^2\end{bmatrix}=i\sigma_2\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix},\qquad \begin{bmatrix}\eta^{\dot{1}}\\ \eta^{\dot{2}}\end{bmatrix}=i\sigma_2\begin{bmatrix}\eta_{\dot{1}}\\ \eta_{\dot{2}}\end{bmatrix} \tag{7.2.15}$$

を**反変スピノル**という. $A^\dagger$ のユニモジュラ性から ${}^tAi\sigma_2A=i\sigma_2$ となるので

$$\xi_1\eta^1+\xi_2\eta^2=\text{不変},\qquad \xi_{\dot{1}}\eta^{\dot{1}}+\xi_{\dot{2}}\eta^{\dot{2}}=\text{不変}. \tag{7.2.16}$$

上の ${}^tAi\sigma_2A=i\sigma_2$ から, もう1つ重要な帰結

$$\sigma_2\overline{A^\dagger}\sigma_2=A^\dagger \qquad (A\text{ がユニタリーのとき})$$

がでる. 共変スピノルに (7.2.13) の変換をしたとき (7.2.15) の点つき反変スピノルは

$$\begin{bmatrix}\eta'^{\dot{1}}\\ \eta'^{\dot{2}}\end{bmatrix}=B\begin{bmatrix}\eta^{\dot{1}}\\ \eta^{\dot{2}}\end{bmatrix},\qquad B\equiv(i\sigma_2)\overline{A^\dagger}(i\sigma_2)^{-1} \tag{7.2.17}$$

に従って変換するので, 上の $\sigma_2\overline{A^\dagger}\sigma_2=A^\dagger$ は, これらのスピノルが座標系の回転 ($A^\dagger=A^{-1}$) に対して (7.2.13) と同じように変換されることを意味している. ついでに動く座標系への変換も計算して

$$B=\begin{cases}A^\dagger & A=A(\beta),\ A(\gamma)\text{ のとき}\\ A^\dagger(-v) & A=A(v)\text{ のとき}\end{cases} \tag{7.2.18}$$

$A(\beta), A(\gamma), A(v)$ は (7.2.4) と (7.2.3) にそれぞれ与えられている.

いま，共変スピノル $\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix}$ と，それに点をつけたものをとると，これらは都合4個の実数成分をもつから

$$\begin{bmatrix}x^0+x^3 & x^1-ix^2\\ x^1+ix^2 & x^0-x^3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix}[\xi_{\dot{1}}\ \xi_{\dot{2}}] \tag{7.2.19}$$

とおけば，右辺の変換(7.2.13)，(7.2.14)により左辺に固有Lorentz変換(7.2.1)がひきおこされる．こうして，4元ベクトル x^μ がいわば平方根に開かれたことになる．(7.2.19)の複素共役をとって左から $i\sigma_2$，右から $(i\sigma_2)^\dagger$ を掛けてみると，左辺は直接に計算し，右辺には(7.2.15)を用いて

$$\begin{bmatrix}x^0-x^3 & -x^1+ix^2\\ -x^1-ix^2 & x^0+x^3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\xi^{\dot{1}}\\ \xi^{\dot{2}}\end{bmatrix}[\xi^1\ \xi^2]. \tag{7.2.20}$$

この左辺は，$x_\mu=g_{\mu\nu}x^\nu$ により共変ベクトルにいいかえられる．

$$\begin{bmatrix}x_0+x_3 & x_1-ix_2\\ x_1+ix_2 & x_0-x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\xi^{\dot{1}}\\ \xi^{\dot{2}}\end{bmatrix}[\xi^1\ \xi^2]. \tag{7.2.21}$$

c) Weylの方程式

さて，(7.2.19)の左辺がPauliのスピン行列によって(7.2.5)のように書けたことを思いだせば，その x^μ を変換性の同じな ∂^μ でおきかえた $\sigma_\mu\partial^\mu$ が(7.2.19)の右辺と同じ変換性をもつことがわかる．それに右から点つき反変スピノルをかけて(7.2.16)に注意すれば，方程式

$$\sigma_\mu\partial^\mu\begin{bmatrix}\varphi^{\dot{1}}\\ \varphi^{\dot{2}}\end{bmatrix}=\kappa\begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix}\qquad (\kappa=\text{定数}) \tag{7.2.22}$$

のLorentz共変なことが知れる．

ここで，とくに $\kappa=0$ にとったものを**Weylの方程式**とよぶ．ていねいに書けば，これは

$$\left(\sigma_0\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}-\sigma_1\frac{\partial}{\partial x}-\sigma_2\frac{\partial}{\partial y}-\sigma_3\frac{\partial}{\partial z}\right)\begin{bmatrix}\varphi^{\dot{1}}\\ \varphi^{\dot{2}}\end{bmatrix}=0 \tag{7.2.23}$$

の形だから，いま $\begin{bmatrix}u^{\dot{1}}\\ u^{\dot{2}}\end{bmatrix}$ を x^μ によらない定数スピノルとして

$$\begin{bmatrix}\varphi^{\dot{1}}\\ \varphi^{\dot{2}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}u^{\dot{1}}\\ u^{\dot{2}}\end{bmatrix}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(Et-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})\right] \tag{7.2.24}$$

という平面波の解を考えてみると，

$$\left(\frac{E}{c}\sigma_0+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)\begin{bmatrix}u^{\dot{1}}\\u^{\dot{2}}\end{bmatrix}=0. \tag{7.2.25}$$

こういう解があるためには

$$\begin{vmatrix}(E/c)+p^3 & p^1-ip^2\\ p^1+ip^2 & (E/c)-p^3\end{vmatrix}=0$$

が必要かつ十分であるが，これはまさしく相対論的な粒子のエネルギーと運動量が満たすべき関係

$$E^2=c^2\boldsymbol{p}^2$$

にほかならない．ただし，粒子の質量はゼロである．

(7.2.22)が負エネルギーの解を許すことは，以前の Klein-Gordon 方程式の場合と異ならないが，こんどは確率の保存がいえる．実際，流束の 4 元ベクトルを

$$J_\mu(\boldsymbol{r},t)=[\overline{\varphi}^{\dot{1}}(\boldsymbol{r},t)\ \ \overline{\varphi}^{\dot{2}}(\boldsymbol{r},t)]\sigma_\mu\begin{bmatrix}\varphi^{\dot{1}}(\boldsymbol{r},t)\\\varphi^{\dot{2}}(\boldsymbol{r},t)\end{bmatrix} \tag{7.2.26}$$

で定義すれば，(7.2.23)とその Hermite 共役から連続の方程式

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}J_0+\frac{\partial}{\partial x_k}J_k=0 \tag{7.2.27}$$

が得られる．ここで，(7.2.26)の流束が相対論的に正しく共変ベクトルとして変換することに注意しよう．事実(7.2.21)に σ_μ をかけてトレースをとると $[\xi^1\ \ \xi^2]\sigma_\mu\begin{bmatrix}\xi^{\dot{1}}\\\xi^{\dot{2}}\end{bmatrix}$ が x_μ と同じ変換性をもつことがわかる．(7.2.27)は，だから，共変形 $\partial^\mu J_\mu=0$ に書くことができる．

§7.3　空間反転，時間反転

2 成分スピノルの空間で表現されるのは固有 Lorentz 変換であって，それにかぎるのだった．いま(7.2.19)と(7.2.20)を比べると

$$\xi_a \rightleftarrows \xi^{\dot{a}},\qquad \xi_{\dot{a}} \rightleftarrows \xi^a \qquad (a=1,2) \tag{7.3.1}$$

なる入れ替えによって(7.1.7)の空間反転 P が表現されていることに気づく．

空間反転(7.3.1)に対して Weyl の方程式は共変でない．このことは，すでに(7.2.24)の形をした正エネルギーの解が‘左まきスピン’をもち，決して右まきスピンをもつことがないというところに現れている．スピンが左まきとは，それ

が常に運動量と逆向きであることをいう．実際に，(7.2.24)は(7.2.25)により $\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}/|\boldsymbol{p}|$ の固有値 $-E/|\boldsymbol{p}c|$ に属する固有状態になっており，$E>0$ のときスピンと運動量は逆向きである．空間反転をすると運動量の向きは変わりスピン角運動量の向きは変わらないから，左まきスピンは右まきにうつる．よって，その一方しか許さない方程式が共変なはずはないのである．

本講座第10巻『素粒子論』には，ニュートリノのスピンが左まきであることを示す実験が述べられている．Weyl の方程式はニュートリノの方程式である．

空間反転に対して共変な方程式の例は

$$\left.\begin{aligned}(\sigma_0\partial^0+\sigma_k\partial^k)\begin{bmatrix}\varphi^{\dot{1}}\\ \varphi^{\dot{2}}\end{bmatrix}&=\kappa\begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix}\\ (\sigma_0\partial^0-\sigma_k\partial^k)\begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix}&=\kappa'\begin{bmatrix}\varphi^{\dot{1}}\\ \varphi^{\dot{2}}\end{bmatrix}\end{aligned}\right\}\tag{7.3.2}$$

という連立方程式で $\kappa=\kappa'$ としたもの．このうち，第1の方程式は(7.2.22)と同じで，(7.2.19)を手がかりに見出したもの．第2の方程式は，それと同じ考え方で(7.2.20)から得た．(7.3.2)において

$$\begin{matrix}\text{空間反転:}\\ \begin{pmatrix}x^k\to -x^k\\ x^0\to x^0\end{pmatrix}\end{matrix}\qquad \begin{bmatrix}\varphi^{\dot{1}}\\ \varphi^{\dot{2}}\end{bmatrix}\rightleftarrows\begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix}\tag{7.3.3}$$

をすると2つの方程式が入れ替わるので，共変性が $\kappa=\kappa'$ を要求するのである．

(7.3.2)から $\varphi^{\dot{a}}$ を消去すれば

$$(\sigma_0\partial^0+\sigma_k\partial^k)(\sigma_0\partial^0-\sigma_k\partial^k)\begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix}=\kappa^2\begin{bmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{bmatrix}.$$

となり

$$\kappa^2=-(mc/\hbar)^2\tag{7.3.4}$$

のとき Klein-Gordon 型の

$$[\partial_\mu\partial^\mu+(mc/\hbar)^2]\chi_a=0\qquad(a=1,2)\tag{7.3.5}$$

になる．こうなったときに平面波解のエネルギーと運動量が m を粒子の質量として相対論的に正しい関係(7.1.18)をもつのだった．

スピノルによる Lorentz 群の表現に空間反転を含ませるために，2組のスピノルを対にして考えることになった．ここまででは，まだ変換は順時的 $\Lambda^0{}_0\geqq 1$ の

ものに限られている．逆時的 $\Lambda^0{}_0 \leqq -1$ の変換をも含めるためには，(7.2.19)，(7.2.20)を見て思いつくように

$$\text{時空の反転:}\ (x^\mu \to -x^\mu) \qquad \begin{bmatrix} \varphi^{\dot 1} \\ \varphi^{\dot 2} \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} \varphi^{\dot 1} \\ \varphi^{\dot 2} \end{bmatrix}, \qquad \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} \longrightarrow -\begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} \tag{7.3.6}$$

とするのが一法である．方程式(7.3.2)は，この変換をしても形を変えない．あるいは(7.3.3)と組み合わせて

$$\text{時間の反転:}\ \begin{pmatrix} x^0 \to -x^0 \\ x^k \to x^k \end{pmatrix} \qquad \begin{bmatrix} \varphi^{\dot 1} \\ \varphi^{\dot 2} \end{bmatrix} \longrightarrow -\begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix}, \qquad \begin{bmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{bmatrix} \longrightarrow \begin{bmatrix} \varphi^{\dot 1} \\ \varphi^{\dot 2} \end{bmatrix}. \tag{7.3.7}$$

こうして固有 Lorentz 群に空間反転と時間の反転をつけ加えたので，(7.1.2)を不変にするものとして定義した Lorentz 変換の全体(full Lorentz group)をつくしたことになる．

§7.4　Dirac 方程式

Dirac が電子のために1928年に書き下した方程式は

$$[\gamma^\mu \partial_\mu + i(mc/\hbar)]\psi = 0 \tag{7.4.1}$$

である．ただし，ψ は4成分をもち，γ^μ は4行4列の行列であって Pauli の行列 σ_k を用いて書けば

$$\gamma^0 = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix}, \qquad \gamma^k = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_k \\ -\sigma_k & 0 \end{bmatrix}. \tag{7.4.2}$$

これまで σ_0 と書いてきた2行2列の単位行列を，ここでは I と書いた．

a)　Dirac スピノル

Dirac 方程式(7.4.1)は，前節の(7.3.2)と同じものである．ただし，波動関数の成分を次のように書きかえてある：

$$\psi = \begin{bmatrix} \psi^1 \\ \psi^2 \\ \psi^3 \\ \psi^4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \chi_1 + \varphi^{\dot 1} \\ \chi_2 + \varphi^{\dot 2} \\ \chi_1 - \varphi^{\dot 1} \\ \chi_2 - \varphi^{\dot 2} \end{bmatrix}.$$

実際，(7.3.2)の2つの方程式を——$\partial^k = -\partial_k$ に注意して——辺々加え，あるいは引いた式を並べると(7.4.1)になる．この ψ を Dirac スピノルとよぶ．

固有 Lorentz 変換にともなう Dirac スピノルの変換は

$$\psi'(x') = L\psi(x) \qquad (x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}x^{\nu}) \tag{7.4.3}$$

ここに，L は (7.2.13) と (7.2.17) から求められ

$$L = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} A^{\dagger}+B & A^{\dagger}-B \\ A^{\dagger}-B & A^{\dagger}+B \end{bmatrix}.$$

(7.2.3)，(7.2.4) および (7.2.18) を用いて具体的に書けば，座標系の回転 (7.1.6) に対して，

$$L(\beta) = \pm\begin{bmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & \sin\frac{\beta}{2} & & 0 \\ -\sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} & & \\ & & \cos\frac{\beta}{2} & \sin\frac{\beta}{2} \\ 0 & & -\sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{bmatrix},$$

$$L(\gamma) = \pm\begin{bmatrix} e^{i\gamma/2} & & & 0 \\ & e^{-i\gamma/2} & & \\ & & e^{i\gamma/2} & \\ 0 & & & e^{-i\gamma/2} \end{bmatrix}. \tag{7.4.4}$$

z 軸の正の向きに速さ v で動く座標系への変換 (7.1.5) に対しては

$$L(v) = \pm\begin{bmatrix} \cosh\frac{\chi}{2} & 0 & -\sinh\frac{\chi}{2} & 0 \\ 0 & \cosh\frac{\chi}{2} & 0 & \sinh\frac{\chi}{2} \\ -\sinh\frac{\chi}{2} & 0 & \cosh\frac{\chi}{2} & 0 \\ 0 & \sinh\frac{\chi}{2} & 0 & \cosh\frac{\chi}{2} \end{bmatrix} \quad \left(\tanh\chi \equiv \frac{v}{c}\right). \tag{7.4.5}$$

そして，(7.1.7) の空間反転に対しては，(7.3.3) より

$$P = \gamma^0. \tag{7.4.6}$$

上の変換行列のうち，回転と空間反転に対するものはユニタリーだが，動く座標

系への変換行列はそうでなく，

$$L(v)^{-1}=\gamma^0 L(v)\gamma^0.$$

さいわい回転と空間反転は γ^0 と可換なので，統一的に

$$L^{-1}=\gamma^0 L^{\dagger}\gamma^0 \tag{7.4.7}$$

としておくことができる．

(7.2.6) などを用いて，あるいは直接の計算によって容易に確かめられるとおり

$$L^{-1}\gamma^{\mu}L=\Lambda^{\mu}{}_{\nu}\gamma^{\nu} \tag{7.4.8}$$

が成り立つので，Dirac 方程式は空間反転も含めて共変的である．時間反転については後に§7.6 b) であらためて吟味する．なお，(7.4.2) の γ 行列が

$$\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}+\gamma^{\nu}\gamma^{\mu}=2g^{\mu\nu} \tag{7.4.9}$$

を満たすことを注意しておこう．この関係も (7.1.8) により共変的である．一般に，この関係を満たす4行4列の行列の組はユニタリー変換を除いて (7.4.2) に一致することが知られている．

b) 物理的解釈

空間反転も含めて共変的な方程式が波動関数の成分を増すことによって得られたわけであるが，この4成分の波動関数は物理的にどう解釈すべきものであろうか？

まず，粒子の存在確率密度はどうなるか．(7.4.1) の Hermite 共役をとると，(7.4.2) により

$$\psi^{\dagger}[\gamma^0\overleftarrow{\partial_0}-\gamma^k\overleftarrow{\partial_k}-i(mc/\hbar)]=0$$

微分演算子の上の矢印は作用すべき相手を指す．この式に右から γ^0 をかけると，(7.4.9) により γ^0 は γ^k と反可換だから

$$\bar{\psi}[\gamma^{\mu}\overleftarrow{\partial_{\mu}}-i(mc/\hbar)]=0 \tag{7.4.10}$$

ここに，¯ は特別の意味をもち†

$$\bar{\psi}\equiv\psi^{\dagger}\gamma^0. \tag{7.4.11}$$

もとの方程式 (7.4.1) と (7.4.10) から‘流束ベクトル’

$$j^{\mu}\equiv\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi \tag{7.4.12}$$

---

† 今後，複素共役は * で表す．

が連続の方程式

$$\partial_\mu j^\mu = 0 \tag{7.4.13}$$

を満たすことがわかる．よって，粒子の存在確率密度を

$$j^0(x) = \psi^\dagger\psi(x) = |\psi^1(x)|^2+|\psi^2(x)|^2+|\psi^3(x)|^2+|\psi^4(x)|^2 \tag{7.4.14}$$

とすれば，これは常に正であるばかりか，粒子が局在しているかぎり全確率はたしかに保存される：

$$\int_{\text{空間全体}} j^0(\boldsymbol{r},t)\,d\boldsymbol{r} = t \text{ に無関係.} \tag{7.4.15}$$

そればかりか，この j^μ はベクトルになっているから，存在確率密度が相対論的共変な意味をもつのである．実際，(7.4.3) の $\psi(x)\to L\psi(x)$ にともなって $\psi^\dagger\to\psi^\dagger L^\dagger$ となるので，(7.4.7) により

$$\bar\psi(x) \longrightarrow \psi^\dagger(x)L^\dagger\gamma_0 = \bar\psi(x)\gamma_0L^\dagger\gamma_0 = \bar\psi(x)L^{-1}.$$

したがって，(7.4.8) により

$$j^\mu(x) \longrightarrow \bar\psi(x)L^{-1}\gamma^\mu L\psi(x) = \Lambda^\mu{}_\nu j^\nu(x).$$

この式の意味は

$$j'^\mu(x') = \Lambda^\mu{}_\nu j^\nu(x) \qquad (x'^\mu=\Lambda^\mu{}_\nu x^\nu) \tag{7.4.16}$$

であって，たしかにベクトル場の変換になっている．

次に，波動関数の成分の多いことが粒子のスピン自由度の反映であることを示そう．このことには前の Weyl 方程式のときすでに触れた．与えられた波動関数 ψ に属する角運動量をみるには，その ψ が座標系の回転にともなってどう変換するか見ればよい——量子力学のこの原則がいまの場合にも通用するものと仮定しよう．まず回転 (7.1.6), (7.4.4) を x^3 軸まわりにとり

$$\psi'(x') = L(\gamma)\psi(\Lambda^{-1}(\gamma)^\mu{}_\nu x'^\nu)$$

において γ を無限小にとると (L は $\gamma=0$ で 1 になるほうを用いる)

$$\psi'(x') = \left[1+\frac{i\gamma}{2}\begin{pmatrix}\sigma_3 & 0\\ 0 & \sigma_3\end{pmatrix}\right]\cdot\left[1+\gamma\left(x^1\frac{\partial}{\partial x^2}-x^2\frac{\partial}{\partial x^1}\right)\right]\psi(x)$$

すなわち

$$\psi'(x') = \left[1+\frac{i}{\hbar}\gamma(L_3+S_3)\right]\psi(x). \tag{7.4.17}$$

ここで，L_3 は軌道角運動量の演算子の第 3 成分として既知であり，S_3 は

$$S_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix}\sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3\end{bmatrix} \tag{7.4.18}$$

の形をしている．これがDirac粒子のスピン演算子の第3成分とみなすべきものである．x^2軸まわりの回転を考えて同様にすればS_2も得られる．x^1軸まわりの回転は，x^2軸とx^3軸まわりのものから合成される．こうして得られるスピン演算子は(7.4.18)から類推されるとおりの形だが，

$$S^{\mu\nu} = \frac{\hbar}{2}\Sigma^{\mu\nu}, \qquad \Sigma^{\mu\nu} \equiv \frac{i}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu) \tag{7.4.19}$$

を定義して$S=(S^{23}, S^{31}, S^{12})$と書けば変換性が見やすい．(7.4.5)が無限小のvで$L(v)=1+(i/\hbar)(v/c)S^{03}$となって$S^{0k}$の意味を教える．$S^{00}=0$である．

こうして，ψの成分がスピン自由度に関わっていることがはっきりした．Weyl方程式での経験からみると，スピン自由度とエネルギーの正負の‘自由度’が重なってψに4成分を要求しているものと考えられる．

c) 自由粒子の解，平面波

上のことを立ち入って調べるために，方程式(7.4.1)を解いてみよう．手始めに，ψは空間座標によらないとして

$$\psi(x) = ue^{-iEt/\hbar} \tag{7.4.20}$$

とおけば，これは運動量0の静止した粒子を表し，Eがそのエネルギーと解釈すべきものであるが，係数スピノルには(7.4.1)から

$$u_+{}^\uparrow = \begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix},\quad u_+{}^\downarrow = \begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix},\quad u_-{}^\uparrow = \begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix},\quad u_-{}^\downarrow = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix} \tag{7.4.21}$$

の4つが得られる．それぞれのEは下つきの$\pm$に応じて$\pm mc^2$で，絶対値はたしかに静止エネルギーに等しい．uはまた上つきの↑，↓でも区別されているが(7.4.18)によると，それぞれはスピンのx^3成分$+\hbar/2, -\hbar/2$をもつ．x^3成分にこれ以外の値が現れないから，Dirac粒子のスピンは($\hbar$を単位に)1/2であることがわかる．

(7.4.21)に空間反転(7.4.6)をほどこすと

$$Pu_+{}^{\uparrow,\downarrow} = u_+{}^{\uparrow,\downarrow}, \qquad Pu_-{}^{\uparrow,\downarrow} = -u_-{}^{\uparrow,\downarrow}. \tag{7.4.22}$$

これは静止しているDirac粒子がエネルギーの正負によって反対のパリティをもつことを示す.

上の解を x^3 軸の負の向きに速さ v で動く座標系から見ると

$$\psi'(x') = L(-v)\psi(\Lambda^{-1}(-v)x')$$
$$= L(-v)u \exp[-(i/\hbar)p_0\Lambda^{-1}(-v)^0{}_\nu x'^\nu]$$

に見える†. これは, Dirac 方程式(*7.4.1*)の共変性から, その解になっており, x'^3 軸の正の向きに走る粒子を表すはずである. だから, 粒子の運動量は $p'^3>0$ となるはず. ところが, 得られた波動の位相は

$$-(i/\hbar)(p_0 \cosh\chi\cdot ct' - p_0 \sinh\chi\cdot x'^3) = -(i/\hbar)p'_\mu x'^\mu$$

と読むべきもので($\tanh\chi=v/c$), x'^μ 系で見た粒子のエネルギーと運動量は

$$E'/c = p_0 \cosh\chi, \qquad p'^3 = -p'_3 = p_0 \sinh\chi$$

となり, 静止系でのエネルギー $p_0c=\pm mc^2$ の正負が, 動く系でのエネルギーを正負にするのみならず, 運動量が速度と逆向きの場合をもひきおこすことがわかる.

係数スピノル $L(-v)u\equiv u(\boldsymbol{p})$ を, それぞれに属するエネルギー・運動量とともに書けば, いま $\boldsymbol{p}=(0,0,p)$ だが

$$u_+{}^\uparrow(0,0,p) = N(p)\begin{bmatrix} E+mc^2 \\ 0 \\ pc \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad u_+{}^\downarrow(0,0,p) = N(p)\begin{bmatrix} 0 \\ E+mc^2 \\ 0 \\ -pc \end{bmatrix} \tag{7.4.23}$$

ここに

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-\left(\dfrac{v}{c}\right)^2}}, \qquad p = \frac{mv}{\sqrt{1-\left(\dfrac{v}{c}\right)^2}}$$

また, 負エネルギーのものは

$$u_-{}^\uparrow(0,0,p) = N(p)\begin{bmatrix} -pc \\ 0 \\ |E|+mc^2 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad u_-{}^\downarrow(0,0,p) = N(p)\begin{bmatrix} 0 \\ pc \\ 0 \\ |E|+mc^2 \end{bmatrix} \tag{7.4.24}$$

---

† $p^\mu\equiv[E/c, \boldsymbol{p}]$. いまは $p^\mu=[mc, 0]$.

ここに

$$E=-\frac{mc^2}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}},\qquad p=-\frac{mv}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}.$$

ただし

$$N(p)\equiv 1/\sqrt{2mc^2(|E|+mc^2)}.$$

これらの解を $u_\varepsilon^{(h)}(\boldsymbol{p})$ と記そう．$h=\uparrow,\downarrow$ であり $\varepsilon=+,-$ はエネルギーの正負を区別する．容易に確かめられるとおり，運動量 $\boldsymbol{p}$ をそろえて内積をとれば

$$u_{\varepsilon'}^{(h')}(\boldsymbol{p})^\dagger u_\varepsilon^{(h)}(\boldsymbol{p})=\frac{E}{mc^2}\delta_{\varepsilon,\varepsilon'}\delta_{h,h'} \tag{7.4.25}$$

規格化がエネルギーによるのは奇妙なようだが，これが動く座標系にうつったときの体積の Lorentz 短縮を打ち消して，きまった‘箱’のなかの存在確率を Lorentz 不変にするのである．わざわざ‘箱’などといって領域といわなかったのは同時性の問題があるからだ．図7.3には空間の x^3 軸方向だけかいてあるが，箱の両端の世界線をひくと，静止系 (x^0, x^3) で PQ の間に粒子の見い出される確率が，動く座標系 (x'^0, x'^3) で P′Q′ の間に見い出される確率に等しいはずである．PQ, P′Q′ がそれぞれの座標系で同時になっていて，長さ P′Q′ が PQ に比べて Lorentz 短縮している．(7.4.25)は，この事実にあっている．

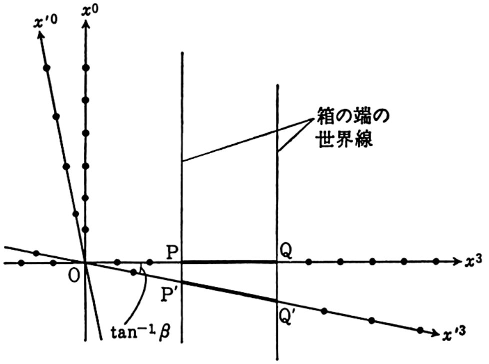


図7.3 x 系に静止している箱の端を x^3 軸の負の向きに走る x' 系から見る．x'^3 軸上の世界点は x' 系ですべて同時刻であって，これと箱の端の世界線との交点を P′, Q′ とすれば，P′Q′ が x' 系における箱の長さを与える．ただし，x'^3 軸の目盛を $\sqrt{(1+\beta^2)/(1-\beta^2)}$ 倍だけ x^3 軸のよりあらくしておく．$\beta\equiv v/c$.

別の言い方をすれば，(7.4.25)の左辺は流束ベクトル(7.4.12)の第0成分にあたるので，エネルギー・運動量ベクトルの第0成分たるエネルギーに比例して変わるわけである．いっそ流束ベクトルを計算してみると，事実

$$\overline{u_s^{(h)}}(\boldsymbol{p})\gamma^\mu u_s^{(h)}(\boldsymbol{p}) = \pm p^\mu/mc^2. \qquad (7.4.26)$$

このことは運動量 $\boldsymbol{p}$ が一般に極角 (θ, φ) の向きにある場合にも確かめておきたい．そのための $u^{(s)}(\boldsymbol{p})$ は (5.2.43) にならって座標系を回転すれば得られる．すなわち，(7.4.4) の $L(\beta), L(\gamma)$ を $L_{31}(\beta), L_{12}(\gamma)$ と書いて

$$u_+{}^{\uparrow}(\boldsymbol{p}) = L_{12}(-\varphi)L_{31}(-\theta)u_+{}^{\uparrow}(0,0,p) = N\begin{bmatrix} (E+mc^2)e^{-i\varphi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} \\ (E+mc^2)e^{i\varphi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ pc\,e^{-i\varphi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} \\ pc\,e^{i\varphi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \end{bmatrix}$$

$$u_+{}^{\downarrow}(\boldsymbol{p}) = L_{12}(-\varphi)L_{31}(-\theta)u_+{}^{\downarrow}(0,0,p) = N\begin{bmatrix} -(E+mc^2)e^{-i\varphi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ (E+mc^2)e^{i\varphi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} \\ pc\,e^{-i\varphi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ -pc\,e^{i\varphi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} \end{bmatrix}$$

これらは，スピンが運動量と平行/反平行な状態を回転して作ったのである．スピン (7.4.19) の運動量に平行な方向の成分を**ヘリシティ**という．$u_+{}^{\uparrow}(\boldsymbol{p})$, $u_-{}^{\downarrow}(\boldsymbol{p})$ はヘリシティの固有状態になっていて，肩符 ↑, ↓ が固有値 1/2, −1/2 にちょうど対応する．

しかし，これらの 1 次結合

$$u^{(1)}(p) \equiv \left[u_+{}^{\uparrow}(p)\cos\frac{\theta}{2} - u_+{}^{\downarrow}(p)\sin\frac{\theta}{2}\right]e^{i\varphi/2}$$

$$u^{(2)}(p) \equiv \left[u_+{}^{\uparrow}(p)\sin\frac{\theta}{2} + u_+{}^{\downarrow}(p)\cos\frac{\theta}{2}\right]e^{-i\varphi/2}$$

を作ると形が簡単になり，場合によってはこのほうが使いやすい．実際，

$$u^{(s)}(p) = N(\boldsymbol{p})\begin{bmatrix} (E+mc^2)\chi_{s_3} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}c\,\chi_{s_3} \end{bmatrix}. \qquad (7.4.27)$$

これは Dirac 方程式の $E>0$ の解($s=1,2$)であるが，$E<0$ の解($s=3,4$)も同様にして

$$u^{(s)}(\boldsymbol{p}) = N(p)\begin{bmatrix} -\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}c\,\chi_{s_3} \\ (|E|+mc^2)\,\chi_{s_3} \end{bmatrix} \tag{7.4.28}$$

ここに，s の偶奇にしたがって $\chi_{s_3}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$ をとるものとする.

これらを用いると，一般に正エネルギー状態のスピノル同士のとき

$$\overline{u^{(s')}}(\boldsymbol{p}')\gamma^\mu u^{(s)}(\boldsymbol{p}) = \chi^{(s')\dagger}M_{++}{}^\mu\chi^{(s)} \qquad (s, s'=1,2) \tag{7.4.29}$$

を得る．ここに

$$\begin{aligned} M_{++}{}^0 &= N(\boldsymbol{p}')N(\boldsymbol{p})\left[(E'+mc^2)(E+mc^2)+c^2(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{p})+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{p}'\times\boldsymbol{p})\right], \\ M_{++}{}^k &= N(\boldsymbol{p}')N(\boldsymbol{p})\left[(E'+mc^2)c\{p^k+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{n}^k\times\boldsymbol{p})\}\right. \\ &\qquad \left.+(E+mc^2)c\{p'^k-i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{n}^k\times\boldsymbol{p}')\}\right]. \end{aligned}$$

ただし，$\boldsymbol{n}^k$ は第 k 軸方向の単位ベクトルである．$\boldsymbol{p}=\boldsymbol{p}'$ にとれば確かに(7.4.26)の成り立つことがわかる．計算には次の公式を用いた:

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}). \tag{7.4.30}$$

これは $\boldsymbol{\sigma}$ と可換な任意の 3 次元ベクトル $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ に対して成り立つもので,

$$\sigma_k\sigma_l A_k B_l = \left[\frac{1}{2}(\sigma_k\sigma_l+\sigma_l\sigma_k)+\frac{1}{2}(\sigma_k\sigma_l-\sigma_l\sigma_k)\right]A_k B_l$$

に $\boldsymbol{\sigma}$ の交換関係と反交換関係(5.2.36)を用いて証明される.

§7.5 中心力場における Dirac 粒子

負のエネルギーの問題をしばらくおくとすれば，相対性原理へのアプローチによって量子力学におけるスピン自由度の位置を明らかにしたことは Dirac 方程式の成功である．その延長上で，この方程式は原子スペクトルの微細構造の説明という成功もおさめた.

(7.4.1)は自由粒子の方程式である．これに力の場を入れるにはどうすべきか？ 力の場はポテンシャル $V(x)$ によって表されるとしよう．そのポテンシャルに定数を加えても力の場は変わらない．エネルギー E を測る原点がずれるだけである．この‘対称性’を保持するとしたら，(7.4.1)を

$$[\gamma^0(i\hbar c\partial_0-V)+i\hbar c\gamma^k\partial_k-mc^2]\,\psi = 0 \tag{7.5.1}$$

と直すのがほとんど必然であろう．V が中心力の場を与える場合をとって，この方程式を解くことを考えよう．

a) 部分波分解

座標の空間部分に極座標 (r, θ, φ) を用い，$V=V(r)$ とする．2成分スピノル u^A, u^B をとって

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) \equiv \begin{bmatrix} u^A(\boldsymbol{r}) \\ u^B(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix} e^{-iEt/\hbar} \tag{7.5.2}$$

とおけば，(7.5.1) は

$$\left.\begin{aligned} i\hbar c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla)u^A &= -(E-V+mc^2)u^B \\ i\hbar c(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla)u^B &= -(E-V-mc^2)u^A \end{aligned}\right\} \tag{7.5.3}$$

となる．

Dirac スピノル $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ が座標系の回転にともない (7.4.17) の変換をするときに，自由粒子の方程式は共変的なのであった．こんど加えたポテンシャルは座標系の回転で変わらないから，ψ を全角運動量 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$ の固有状態に選んでおけば (7.5.1) は変数分離して動径関数に対する方程式を与えるはずである．スピン演算子 $\boldsymbol{s}\equiv(\hbar/2)\boldsymbol{\sigma}$ は，(7.4.18) から類推されるように u^A, u^B に別々に作用するから，これらを別々に——しかし同じ固有値の——$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{s}}$ の固有状態にとる．ここに，$\hat{\boldsymbol{L}}\equiv\boldsymbol{L}/\hbar$, $\hat{\boldsymbol{s}}\equiv\boldsymbol{\sigma}/2$.

$\hat{\boldsymbol{J}}$ の大きさが j, x^3 成分が j_3 の固有ベクトルは，軌道角運動量とスピンの固有ベクトルから表 5.1 により 2 通りにつくられる：1 つは $l=j-\dfrac{1}{2}$ のもので

$$\mathcal{Y}_{j,j_3}{}^{(+)}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{l+j_3+\frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_{l,j_3-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} + \sqrt{\frac{l-j_3+\frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_{l,j_3+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix} \tag{7.5.4}$$

もう 1 つは $l=j+\dfrac{1}{2}$ のもので

$$\mathcal{Y}_{j,j_3}{}^{(-)}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{l-j_3+\frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_{l,j_3-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} + \sqrt{\frac{l+j_3+\frac{1}{2}}{2l+1}}\, Y_{l,j_3+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}. \tag{7.5.5}$$

これらは，いま同じjで考えるから，lが1だけちがい，したがってパリティが反対になる．

これらのベクトルに対する$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla)$の作用を考えよう．公式(7.4.30)から得られる$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})^2=r^2$に注意し，もう一度その公式を用いて，

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla)=\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})}{r^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla)=\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})}{r^2}[(\boldsymbol{r}\cdot\nabla)-2(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}})] \tag{7.5.6}$$

$2(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}})=\hat{\boldsymbol{J}}^2-\hat{\boldsymbol{L}}^2-\hat{\boldsymbol{s}}^2$だから

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla)\mathcal{Y}_{j,j_3}{}^{(\pm)}=\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})}{r^2}\mathcal{Y}_{j,j_3}{}^{(\pm)}\left[r\frac{\partial}{\partial r}\mp\left(j+\frac{1}{2}\right)+1\right]. \tag{7.5.7}$$

ところが$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})/r$は$\hat{\boldsymbol{J}}$と可換なので$j, j_3$の値を変えない．$l$の値は(5.2.26)により1だけ変える．こうして$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})/r$は(7.5.4)と(7.5.5)を入れかえることがわかった．これは$J_\pm$と可換なので行列要素$\langle\mathcal{Y}_{j,j_3}{}^{(-)}|(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})/r|\mathcal{Y}_{j,j_3}{}^{(+)}\rangle$は$j_3$によらない．そこで$j_3=l+\dfrac{1}{2}$の場合を計算することにしよう．(7.5.4), (7.5.5)から

$$\mathcal{Y}_{j,j}{}^{(+)}(\theta,\varphi)=Y_{j-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$$

$$\mathcal{Y}_{j,j}{}^{(-)}(\theta,\varphi)=-\sqrt{\frac{1}{2j+2}}\,Y_{j+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}+\sqrt{\frac{2j+1}{2j+2}}\,Y_{j+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$

であり，他方$\sigma_\pm$を(5.2.4)の$\sqrt{2}$を2にかえて定義すれば

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})/r=(-\sigma_+e^{-i\varphi}+\sigma_-e^{i\varphi})\sin\theta+\sigma_3\cos\theta$$

であるから，問題の行列要素は(5.2.26)を用いて計算され-1とわかる．よって

$$\frac{(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})}{r}\mathcal{Y}_{j,j_3}{}^{(\pm)}=-\mathcal{Y}_{j,j_3}{}^{(\mp)}. \tag{7.5.8}$$

さて，(7.5.7), (7.5.8)によって方程式(7.5.3)をみると，u^Aとu^Bのパリティを反対にして

$$u^A(\boldsymbol{r})=\frac{G_j{}^{(\pm)}(r)}{r}\mathcal{Y}_{j,j_3}{}^{(\pm)},\qquad u^B(\boldsymbol{r})=i\frac{F_j{}^{(\pm)}(r)}{r}\mathcal{Y}_{j,j_3}{}^{(\mp)} \tag{7.5.9}$$

とおくべきことがわかる†．つまり，複号同順．＋は$j=l+\dfrac{1}{2}$，－は$j=l-\dfrac{1}{2}$の

† 同様のことに(7.4.22)ですでに出会った．

場合である．(7.5.9)を(7.5.2)に入れて得られる ψ を $\psi_{j,j_3}{}^{(\pm)}$ と書くことにしよう．この $^{(\pm)}$ を $^{(\pi)}$ で書いておくと便利である(表7.1, κ は後出)．

表 7.1

π	j が与えられた場合		l が与えられた場合	
	l	κ	j	κ
$+$	$j-\frac{1}{2}$	$-\left(j+\frac{1}{2}\right)$	$l+\frac{1}{2}$	$-(l+1)$
$-$	$j+\frac{1}{2}$	$j+\frac{1}{2}$	$l-\frac{1}{2}$	l

b) 動径方程式

(7.5.3)は，(7.5.9)によって変数分離し，

$$\left.\begin{aligned} \hbar c\left(\frac{dG}{dr}+\frac{\kappa}{r}G\right) &= (mc^2+E-V)F \\ \hbar c\left(\frac{dF}{dr}-\frac{\kappa}{r}F\right) &= (mc^2-E+V)G \end{aligned}\right\} \tag{7.5.10}$$

を与える．ただし，F と G の添字は省略し，(7.5.9)の複号の順にあわせて

$$\kappa = \mp\left(j+\frac{1}{2}\right) \tag{7.5.11}$$

とした．κ は(7.5.6)からわかるように $-2(\hat{\boldsymbol{L}}\cdot\hat{\boldsymbol{s}})-1$ の固有値である．

この方程式(7.5.10)の解が遠方でどのように振舞うかを見ておこう．$r\to\infty$ では，もしポテンシャルが $O(1/r)$ なら，およそ

$$\frac{d}{dr}\begin{bmatrix} G \\ F \end{bmatrix} = \frac{1}{\hbar c}\begin{bmatrix} 0 & mc^2+E \\ mc^2-E & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} G \\ F \end{bmatrix}$$

なので，

$$1/a \equiv 2[(mc^2)^2-E^2]^{1/2}/\hbar c \tag{7.5.12}$$

として

$$\begin{bmatrix} G(r) \\ F(r) \end{bmatrix} \underset{r\to\infty}{\widetilde{\quad}} \frac{1}{\sqrt{2mc^2}}\begin{bmatrix} [mc^2+E]^{1/2} \\ -[mc^2-E]^{1/2} \end{bmatrix} e^{-r/2a} \tag{7.5.13}$$

と

$$\begin{bmatrix} G(r) \\ F(r) \end{bmatrix} \underset{r\to\infty}{\widetilde{\quad}} \frac{1}{\sqrt{2mc^2}}\begin{bmatrix} [mc^2+E]^{1/2} \\ [mc^2-E]^{1/2} \end{bmatrix} e^{r/2a} \tag{7.5.14}$$

との2つの解がある．$a>0$ のとき第2の解はすてなければならない．こうして遠方で $O(1/r)$ のポテンシャルの場合，a が実数になるか虚数になるかに応じて

$$\left.\begin{array}{ll}\text{束縛状態では} & |E| \leqq mc^2 \\ \text{散乱状態では} & |E| \geqq mc^2\end{array}\right\} \tag{7.5.15}$$

となることがわかる．スピノル ψ の上の成分 u^A が大きいか下の成分 u^B が大きいかは E の正負による．いずれにせよ，E が mc^2 に近いなら，それらの大きさは極端にちがう．mc^2 は電子の場合およそ 0.5 MeV だから $|mc^2-|E||=10\ \mathrm{eV}$ とすると $|mc^2-|E||^{1/2}/(mc^2+|E|)^{1/2}=3\times10^{-3}$ である．$|E|$ と mc^2 との差を運動エネルギーとみて $mv^2/2$ とおけば，この比は $v/2c$ となる．

(7.5.10)を未知関数1つの方程式に直そう．(7.5.13)で $\rho=r/a$ とおき，少なくとも遠方ではスピノル ψ の上の成分が‘大きい’解を予想して，

$$\left.\begin{aligned} G(r) &\equiv [1+(E/mc^2)]^{1/2}[f(\rho)+g(\rho)]e^{-\rho/2} \\ F(r) &\equiv [1-(E/mc^2)]^{1/2}[f(\rho)-g(\rho)]e^{-\rho/2}\end{aligned}\right\} \tag{7.5.16}$$

とおく．遠方では g が優勢で，それでもせいぜい ρ のベキで増すくらいだろう．(7.5.10)にこれを代入して

$$\left.\begin{aligned} \frac{df}{d\rho} &= (1+\varepsilon V)f-\left(\frac{\kappa}{\rho}-\mu V\right)g \\ \frac{dg}{d\rho} &= \qquad -\varepsilon Vg-\left(\frac{\kappa}{\rho}+\mu V\right)f\end{aligned}\right\} \tag{7.5.17}$$

ここに

$$\mu \equiv \frac{1}{2}\frac{mc^2}{(mc^2)^2-E^2}, \qquad \varepsilon \equiv \frac{1}{2}\frac{E}{(mc^2)^2-E^2} \tag{7.5.18}$$

もし $\kappa\rho^{-1}+\mu V\neq0$ ならば，(7.5.17)の第2式により f が g で表せるから，これを微分した $df/d\rho$ とともに第1式に代入すれば，g だけの方程式が得られる：

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+a(\rho)\frac{d}{d\rho}+b(\rho)\right]g(\rho)=0. \tag{7.5.19}$$

ただし

$$\left.\begin{aligned} a(\rho) &\equiv -\frac{d}{d\rho}\log\left|\frac{\kappa}{\rho}+\mu V\right|-1 \\ b(\rho) &\equiv \frac{\kappa\varepsilon}{\kappa+\mu\rho V}\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}(\rho V)-\varepsilon V-\frac{\kappa^2}{\rho^2}+\left(\frac{a}{\hbar c}\right)^2V^2\end{aligned}\right\}. \tag{7.5.20}$$

c) 水素原子

問題の Dirac 粒子を電子としよう. Coulomb ポテンシャル

$$V = -Ze^2/r \qquad (Z>0)$$

の場合, 上の a, b は奇跡的に簡単になり, (7.5.19) は

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2}-\left(1-\frac{1}{\rho}\right)\frac{d}{d\rho}+\left(\frac{\alpha_1\varepsilon_1}{\rho}+\frac{{\alpha_1}^2-\kappa^2}{\rho^2}\right)\right]g = 0 \tag{7.5.21}$$

となる. ここに

$$\varepsilon_1 \equiv \frac{E}{\sqrt{(mc^2)^2-E^2}}, \qquad \alpha_1 \equiv Z\alpha. \tag{7.5.22}$$

$\alpha\equiv e^2/\hbar c$ は微細構造定数 1/137.036. この項では束縛状態を考え, $0<E<mc^2$ とする. 原点の近くで $g\sim\rho^\gamma$ となるものとして (7.5.21) に入れ

$$\gamma(\gamma-1)+\gamma+{\alpha_1}^2-\kappa^2 = 0$$

から $\gamma=\pm\sqrt{\kappa^2-{\alpha_1}^2}$. この κ^2 は (7.5.11) から $\geqq 1$ であり, ${\alpha_1}^2\doteqdot(Z/137)^2$ なので, 小さい Z に対して $|\gamma|$ は実数で 1 より大して小さくならない. ところが波動関数の 2 乗可積分の要請があり, (7.5.17) からみて f も原点近くで $g\sim\rho^\gamma$ と同じ振舞いをするから, $2\gamma>-1$ でなければならない. これで, 小さい Z の Coulomb ポテンシャルの場合, 負号の $\gamma=-\sqrt{\kappa^2-{\alpha_1}^2}$ は排除される. こうして

$$\gamma = \sqrt{\kappa^2-{\alpha_1}^2}. \tag{7.5.23}$$

負号が排除されるのは $Z<119$ の場合である. $119\leqq Z\leqq 137$ では $\kappa^2=1$ に対してだけ $\gamma=-\sqrt{\kappa^2-{\alpha_1}^2}$ も許される.

いま原子の電子を考えるものとすれば, Z の大きい超重元素としては, 現在 $Z=105$ ないし 106 までの‘超ウラン元素’が人工合成されている. それに加えて, $Z=116, 124, 126$ に相当する特性 X 線が自然の雲母の含有物から陽子照射で得られたという報告もでている†.

しかし, 上の問題は $r=0$ まで Coulomb ポテンシャルが正確に成り立つとした場合のこと. 原子核は有限の大きさをもっているのだから, $r=0$ の Coulomb ポテンシャルの特異性は, おそらく消えているだろう. そうだとすれば, $r=0$ の境界条件は $Z=0$ として $f, g\sim\rho^\kappa$ にとるのがよく, 波動関数は原子核から外に

† Hodgson, P.: *Nature*, **261**, 627 (1976). またこの問題の総合的な解説として: 竹腰英子: 超重元素を探る, 日本物理学会誌, 1977 年 1 月号.

出てはじめて(7.5.23)のγでだいたいρ^{γ}のように振舞うことになるのだろう．というのは，原子核内部で波動関数が$\sim\rho^{\kappa}$なら，それらの表面での値は小さいから，そこで大きな値をとる$\rho^{-\gamma}$の成分は混じり込んだとしてもごく少しであるにちがいないからである．このような物理的な基礎から，Zがたとえ大きくても，137よりはかなり小さいうちは，(7.5.23)をとるべきだと考えられる．しかし，Zが137に近づくと$\kappa=1$では核表面でのρ^{γ}と$\rho^{-\gamma}$の値の差が小さくなり，Zが137を越えると小さいκでγが虚数になるということが始まるので，別の考察を要する．$Z>137$の場合については，巻末に掲げるK. M. Caseの論文(1950)などを参照されたい．

ここでは，Zは137よりはかなり小さいものとして(7.5.23)をとり

$$g(\rho)\equiv\rho^{\gamma}w(\rho) \tag{7.5.24}$$

とおく．微分方程式(7.5.21)は$\rho=0$を確定特異点とするから，このwは$1+a_1\rho+\cdots$の形の級数解をもつはずである．実際，(7.5.21)から，wの満たす微分方程式は

$$\left[\rho\frac{d^2}{d\rho^2}+(2\gamma+1-\rho)\frac{d}{d\rho}-(\gamma-\alpha_1\varepsilon_1)\right]w=0 \tag{7.5.25}$$

で(5.5.4)と同形，つまり合流型超幾何方程式である(ただし(5.5.4)とちがって$2\gamma+1$が整数とは限らない)．よって，原点で正則なほうの解は

$$g(\rho)=\rho^{\gamma}F(\gamma-\alpha_1\varepsilon_1,\ 2\gamma+1\,;\rho). \tag{7.5.26}$$

このgが(7.5.16)という電子の波動関数の遠方での振舞いを定め，そこで$e^{-\rho/2}$を打ち消してしまうことはないはずだった．それには(5.5.10)と同様の条件

$$\gamma-\alpha_1\varepsilon_1=-n' \qquad (n'=0,1,2,\cdots)$$

が必要である．これから(7.5.22)を参照してエネルギー固有値が定まる．

$$E=mc^2\left[1+\left(\frac{Z\alpha}{n'+\sqrt{\kappa^2-(Z\alpha)^2}}\right)^2\right]^{-1/2}, \tag{7.5.27}$$

ただしκは(7.5.11)により定義されている．

いそいで注意しなければならないが，$n'=0$のとき$\sqrt{1-(E/mc^2)^2}=\alpha_1/|\kappa|$となるので，(7.5.12), (7.5.18)により計算して$\kappa>0$では$\kappa\rho^{-1}+\mu V=0$．つまり(7.5.19)を導いたときの仮定が破れている．このとき，(7.5.17)の第2式は$dg/d\rho=(\alpha_1\varepsilon_1/\rho)g$となって(7.5.26)と同じ$g=\rho^{\gamma}$を与えるが，これを(7.5.17)

の第１式に入れると

$$\frac{df}{d\rho}=\left(1-\frac{\gamma}{\rho}\right)f-2\kappa\rho^{\gamma-1}$$

となる．いま $\gamma>0$ としているから $\rho\sim0$ では $df/d\rho\sim-\gamma f/\rho$．よって $f\sim\rho^{-\gamma}$．これは棄てねばならない解である．$\kappa>0$ ではこの解しかないのだから

$$n'=0 \quad \text{のとき} \qquad \kappa=-\left(j+\frac{1}{2}\right) \tag{7.5.28}$$

しか許されないことになる．この場合は(7.5.17)で第１式の g の係数が 0 になり，$f\equiv0$ が解である．

この場合を除けば，(7.5.17)により g から f が求まる．まとめて

$$\left.\begin{aligned} f(\rho) &= -N_0\frac{n'}{N_1}\rho^{\gamma}F(-n'+1,2\gamma+1;\rho)\\ g(\rho) &= \quad N_0N_1\rho^{\gamma}F(-n',\quad 2\gamma+1;\rho). \end{aligned}\right\} \tag{7.5.29}$$

ここに

$$\left.\begin{aligned} N_0 &= \frac{[\Gamma(2\gamma+n'+1)]^{1/2}}{\Gamma(2\gamma+1)\sqrt{n'!}}\left[\frac{a^{-1}}{4Z\alpha}\sqrt{1-\left(\frac{E}{mc^2}\right)^2}\,\right]^{1/2}\\ N_1 &= \left[-\kappa+Z\alpha\Big/\sqrt{1-\left(\frac{E}{mc^2}\right)^2}\,\right]^{1/2} \end{aligned}\right\} \tag{7.5.30}$$

であって，(7.5.2)などに対して規格化

$$\int\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}=\int[u^{A\dagger}(\boldsymbol{r})u^{A}(\boldsymbol{r})+u^{B\dagger}(\boldsymbol{r})u^{B}(\boldsymbol{r})]d^3\boldsymbol{r}$$

$$=\int_0^{\infty}[|G(r)|^2+|F(r)|^2]d^3\boldsymbol{r}=1$$

を果たす．

エネルギー固有値(7.5.27)は，主量子数 $n=n'+j+\dfrac{1}{2}$ を導入して

$$E_{nj}=mc^2\left[1+\left(\frac{Z\alpha}{n-\left(j+\frac{1}{2}\right)+\sqrt{\left(j+\frac{1}{2}\right)^2-(Z\alpha)^2}}\right)^2\right]^{-1/2} \tag{7.5.31}$$

と書かれる(微細構造の公式)．場が弱いとして $Z\alpha$ で展開してみると，この n が非相対論的な場合の主量子数にあたることがわかる(後の(7.5.32)式)．固有状態は (n,l,j,m) で指定する．もちろん軌道角運動量は保存量でないが，この l は

スピノルの‘大きい’成分 [(7.5.9)の u^A] のもつ軌道角運動量の大きさである．j, m は全角運動量の大きさと z 成分で，これらは保存される．表7.2にエネルギーの低い状態をいくつか示す．エネルギー固有値は l, m に関して縮退している．

表7.2

	n	l	j	κ	E_{nj}/mc^2
$1s_{1/2}$	1	0	1/2	-1	$\sqrt{1-(Z\alpha)^2}$
$2s_{1/2}$	2	0	1/2	-1	$\sqrt{\frac{1}{2}(1+\sqrt{1-(Z\alpha)^2})}$
$2p_{1/2}$	2	1	1/2	1	$\sqrt{\frac{1}{2}(1+\sqrt{1-(Z\alpha)^2})}$
$2p_{3/2}$	2	1	3/2	-2	$\sqrt{1-(Z\alpha/2)^2}$
$3p_{1/2}$	3	1	1/2	1	$\dfrac{2+\sqrt{1-(Z\alpha)^2}}{\sqrt{5+4\sqrt{1-(Z\alpha)^2}}}$

$2s_{1/2}$ と $2p_{1/2}$ の縮退が量子電磁力学的な効果であるLambシフトによって解かれる様子も含めてエネルギー準位を図7.4に示す．Diracは方程式(7.4.1)を提出したとき，図7.4のエネルギー準位の微細構造を摂動論で計算した．その直後にDarwinが厳密解をだした．いずれにせよ，これが実験によく一致しDirac方程式に強い支持を与えたのだった．1928年のことである．

非相対論的の極限を詳しく調べてみよう．$(Z\alpha)^2 \ll 1$ として(7.5.31)を展開すると

$$\frac{E_{nj}-mc^2}{mc^2} = -\frac{(Z\alpha)^2}{2}\frac{1}{n^2}+(Z\alpha)^4\left[\frac{3}{8n^4}-\frac{1}{2j+1}\frac{1}{n^3}\right]+\cdots \qquad (7.5.32)$$

となり，さきにも注意したとおり，最低次の近似が非相対論的な(5.5.12)に一致する．ここまでの近似では，(7.5.12)による $\rho=r/a$ も(5.5.2)の ρ に等しい．しかも(7.5.30)の N_1 は $\sqrt{-\kappa+n}$ となるので，まず

$$\kappa = j+\frac{1}{2} \qquad \text{すなわち} \qquad j = l-\frac{1}{2} \qquad (7.5.33)$$

の状態 $\psi_{j,j_3}{}^{(-)}$ については

$$N_1 \doteqdot \sqrt{n'}.$$

これが(7.5.29)を(7.5.16)に入れやすくする：

$$G^{(-)}(r) \propto \rho^{\gamma}[F(-n'+1, 2\gamma+1; \rho)-F(-n', 2\gamma+1; \rho)]e^{-\rho/2}.$$

これに比べて，もう一方の $F^{(-)}(r)$ は因子 $\sqrt{1-(E/mc^2)}$ だけ小さいので無視してよい．合流型超幾何関数の漸化式――(5.5.7)を $\gamma \neq$ 正整数に拡張した公式から

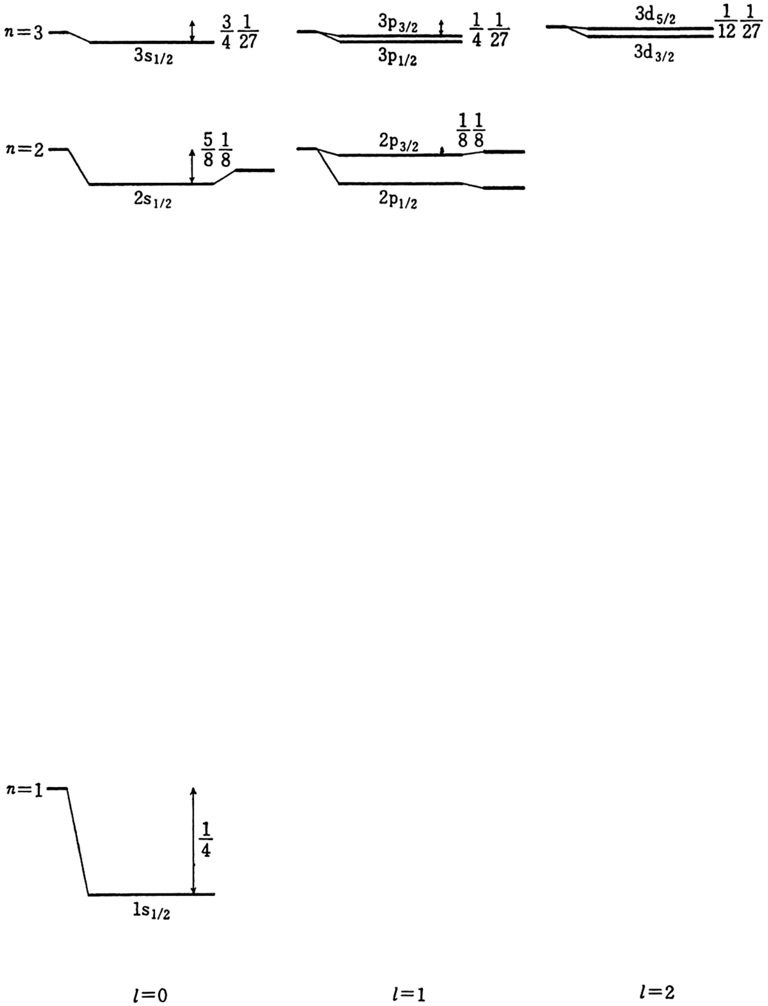


図 7.4　Coulomb 場におけるエネルギー準位．各 l について，左端の短かい線は非相対論的な準位で，中央の長い線が Dirac 理論による準位．これらの差(微細構造)を α^2 Ry を単位に分数で示す．1 Ry$\equiv me^4/2\hbar^2$．これに対し量子電磁力学的な Lamb シフトは α^3 Ry のオーダーで，たとえば $n=2$ の準位を右端の太くて短かい線に変え，Dirac 理論にある $2s_{1/2}$ と $2p_{1/2}$ の縮退を解く．各準位は，電子と原子核のスピンの相互作用により $\alpha^2(m/M)$ のオーダーで 2 つに分裂する(超微細構造)．ただし M は原子核の質量．

$ze^{zt}=de^{zt}/dt$ として部分積分するなどで得られる——により

$$G^{(-)}(r)\propto(2\gamma+1)^{-1}\rho^{\gamma+1}F(-n'+1,2\gamma+2\,;\,\rho)e^{-\rho/2}.$$

となるが，いまの近似では $\gamma\doteqdot|\kappa|$ なので，(7. 5. 33) を再び用いて，(7. 5. 9) から

$$u^A(\boldsymbol{r})\propto\rho^l F(l+1-n,2l+2\,;\,\rho)e^{-\rho/2}\mathcal{Y}_{j,j_3}{}^{(-)}. \qquad (7.5.34)$$

この動径関数は (5. 5. 11) の与える非相対論的な $R_{nl}(r)$ に完全に一致している．ψ の小さい成分 $u^B(\boldsymbol{r})$ は $F^{(-)}(r)$ を無視したのでゼロである．

非相対論的の場合に漸近するのは (7. 5. 33) の $\psi_{j,j_3}{}^{(-)}$ に限らない．同じことは

$$\kappa=-\left(j+\frac{1}{2}\right)\qquad \text{すなわち}\qquad j=l+\frac{1}{2}$$

の状態 $\psi_{j,j_3}{}^{(+)}$ についてもいえる．こんどは $N_0N_1\doteqdot(N_0/N_1)(n'+2\gamma)$ となるので漸化式は $G^{(+)}(r)\propto\rho^{\gamma}F(-n',2\gamma\,;\,\rho)$ を与え (7. 5. 34) が示される．

波動関数はどんな形だろう？　極端な場合として $n'=0$ を見よう．近似なしに波動関数を書くと全角運動量 j,j_3 に対して $n=j+\dfrac{1}{2}$，$l=j-\dfrac{1}{2}$ の状態 $\psi_{n,l,j,j_3}{}^{(+)}$ では

$$\begin{bmatrix}u^A(\boldsymbol{r})\\u^B(\boldsymbol{r})\end{bmatrix}=\sqrt{\frac{1}{2|\kappa|\Gamma(2\gamma+1)a^3}}\left(\frac{r}{a}\right)^{\gamma-1}e^{-r/2a}\begin{bmatrix}\sqrt{|\kappa|+\gamma}\,\mathcal{Y}_{j,j_3}{}^{(+)}\\-i\sqrt{|\kappa|-\gamma}\,\mathcal{Y}_{j,j_3}{}^{(-)}\end{bmatrix}$$

となる．ここに

$$\kappa=-\left(j+\frac{1}{2}\right),\qquad \gamma=\sqrt{\kappa^2-(Z\alpha)^2},\qquad a=(|\kappa|/2Z)a_{\mathrm{B}}.$$

であって，a_{B} は Bohr 半径である．

さらに $l=0$ とすれば，これは基底状態 $1\mathrm{s}_{1/2}$ だが，波動関数が $r=0$ で $r^{\sqrt{1-(Z\alpha)^2}-1}$ のように弱いながらも発散することが注目される．しかし，r をかけた上で図 7. 5 に示す非相対論的の場合との比較を見よ．

この基底状態では，$j_3=\dfrac{1}{2}$ の状態でいうと

$$\mathcal{Y}_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}{}^{(l=0)}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\qquad \mathcal{Y}_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}{}^{(l=1)}=-\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\begin{bmatrix}\cos\theta\\\sin\theta\cdot e^{i\varphi}\end{bmatrix}$$

となり，スピノルの大きい成分のスピンは常に上向きだが，小さい成分のスピンはゆらいでいる．$j_3=-\dfrac{1}{2}$ の状態にも同様のゆらぎがある．

ところで，Dirac の方程式は Lorentz 変換に関する共変性を原理として立てたものだが，その原理は原子核と電子の相対運動に対して適用できるものだろう

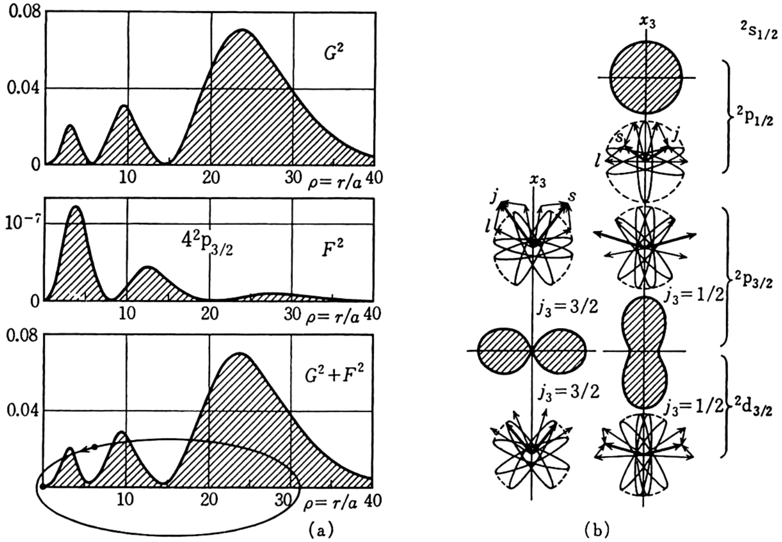


図7.5　水素原子におけるDirac電子の位置の確率密度 $r^2\psi^\dagger\psi(\boldsymbol{r})$ は，動径部分(a)と角部分(b)の積になる．動径部分は，ほとんど非相対論的のもの(図5.31)に近い G^2 に小さい補正 F^2 が加わる形．$4^2p_{3/2}$ 状態について示す．楕円は古典軌道の大きさを表している．角部分は，軌道角運動量 $\boldsymbol{l}$ が全角運動量 $\boldsymbol{j}=\boldsymbol{l}+\boldsymbol{s}$ のまわりに歳差運動し，$\boldsymbol{j}$ が x_3 軸のまわりに歳差運動するとして軌道面の変動を考えればおよそ理解される．非相対論的の図5.9と比較せよ．(White, H. E.: *Phys. Rev.*, 38, 513(1931)による)．

か？　方程式(*7.5.1*)は，あたかも電子の運動だけLorentz変換できるかのように考えて立てられたことにならないか？　原子核の変数も入れなければ相対論的な方程式は書けないはずだ．こういう疑問を，スペクトルの微細構造の説明に成功したDirac理論に対してEddingtonが表明した(1942)．DiracとPeierls, Pryceは，これに答えて，相対論的共変性にもとづいて立てた自由電子の方程式にポテンシャルの項を加える際には，電子の運動は電子のいる位置の近傍の‘場’に影響され，その場が何によってつくられたかには影響されないという‘仮説’を加えるのだと述べた．もちろん，原子核の質量を有限とすれば，(*7.5.1*)にはとり入れられていない種々の付加的な効果が現れる．

d)　Coulomb散乱

Coulomb場による散乱を考えよう．束縛状態のときとちがって場を引力型にかぎるいわれはないから，前項の $-Z$ を ZZ' でおきかえ，その符号は任意とする．$\alpha_1\equiv -ZZ'\alpha$ となるわけだ．ここでも負エネルギーの状態は考慮の外におく

として，散乱状態では $E>mc^2$．その波動関数は束縛状態の(7.5.29)から解析接続によって得られる．

まず，変数 $\rho=r/a$ は(7.5.12)の a を用いて定義したのだったが，そこでは，図7.6のように切断を入れた複素 E 平面を考えていえば，$0<E<mc^2$ の A 点で $(mc^2)^2-E^2=(mc^2-E)(mc^2+E)$ の偏角を 0 としていたことになる．この偏角は，散乱状態の $E>mc^2$ として切断線の上岸の B をとることに定めれば $-\pi$ になるから

$$[(mc^2)^2-E^2]^{1/2}=e^{-\pi i/2}\sqrt{E^2-(mc^2)^2}.$$

ついでながら，$[mc^2-E]^{1/2}$ についても同様．そこで，$E<mc^2$ の波動関数を $E>mc^2$ に解析接続するとき，(7.5.12)では

$$1/a=-2i\sqrt{E^2-(mc^2)^2}/\hbar c\equiv -2ik \tag{7.5.35}$$

とおきなおす．この k は散乱される粒子の無限遠における波数であり，$\rho=-2ikr$ となる点も非相対論的の(5.5.15)と同じである．

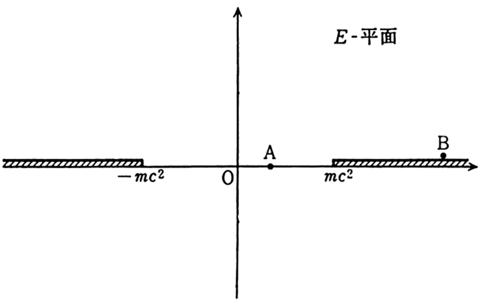


図7.6

(7.5.29)の $-n'$ は，もともと(7.5.26)の $\gamma-\alpha_1\varepsilon_1$ だったから，(7.5.22)の ε_1 を(7.5.35)のように書きかえて

$$\alpha_1\varepsilon_1=i\alpha_1 E/\sqrt{E^2-(mc^2)^2}\equiv in,\qquad \alpha_1\equiv -ZZ'\alpha$$

とおく．この n は非相対論的の極限で(4.5.15)になる．主量子数と混同しないでほしい．こうすると(7.5.29)において

$$n'=\gamma+in,\qquad N_1=[-\kappa+i\alpha_1/\sqrt{(E/mc^2)^2-1}]^{1/2}$$

となり，著しいことに $|-n'/N_1{}^2|=1$ が成り立つので

$$\frac{-n'}{N_1{}^2}\cdot\frac{\gamma-in}{\gamma+in}=\frac{\gamma-in}{N_1{}^2}\equiv e^{-2i\eta} \tag{7.5.36}$$

とおく．左辺に第2因子を加えたのはηの定義を慣用†に合わせるためである．そこで(*7.5.16*)の$G(r)$, $F(r)$を計算しよう．まず

$$f(\rho)\pm g(\rho)$$
$$=N_0\frac{N_1e^{-i\eta}}{\gamma-in}(-2ikr)^{\gamma}[(\gamma+in)e^{-i\eta}F(\gamma+1+in,2\gamma+1;-2ikr)$$
$$\pm(\gamma-in)e^{i\eta}F(\gamma+in,2\gamma+1;-2ikr)]$$

に，Kummerの第1定理——(*4.5.6*)で積分変数を$t\to1-t$と変えれば直ちに得られる——

$$F(\alpha,\gamma;z)=e^zF(\gamma-\alpha,\gamma-z) \tag{7.5.37}$$

を用いると，(*7.5.16*)が

$$\left.\begin{array}{l}G(r)\\ iF(r)\end{array}\right\}=\sqrt{(E/mc^2)\pm1}\,[f(\rho)\pm g(\rho)]e^{-\rho/2}$$
$$=N\sqrt{(E/mc^2)\pm1}\,(2kr)^{\gamma}$$
$$\cdot[(\gamma+in)e^{-i\eta}e^{ikr}F(\gamma+1+in,2\gamma+1;-2ikr)\pm\text{c. c.}] \tag{7.5.38}$$

ただし

$$N\equiv N_0N_1e^{-i\eta}(-i)^{\gamma}/(\gamma-in) \tag{7.5.39}$$

であり，c. c. は複素共役，複号は上側がGを，下側がFを表す．このGとFを用いて波動関数が(*7.5.9*)によって与えられるのであった．

散乱の実験は状態の準備も結果の観測も散乱中心からはるか遠くで行うのである．いまの波動関数(*7.5.38*)が$r\to\infty$でどう振舞うかは合流型超幾何関数の漸近公式(p. 294)から知れる．状態を明示するための添字$\pi=+,-$とjをつけて

$$\left.\begin{array}{l}G_j^{(\pi)}(r)\\ iF_j^{(\pi)}(r)\end{array}\right\}\underset{r\to\infty}{\sim}C'\frac{\sqrt{2\pi}}{ik}\sqrt{2l_\pi+1}\left\{\begin{array}{l}\sqrt{(E/mc^2)+1}\\ \sqrt{(E/mc^2)-1}\end{array}\right\}$$
$$\cdot[e^{i(l_\pi+1)\pi}e^{-i(kr-n\log2kr)}\pm e^{2i\delta_j^{(\pi)}}e^{i(kr-n\log2kr)}]. \tag{7.5.40}$$

ここに

$$e^{2i\delta_j^{(\pi)}}=\frac{\Gamma(\gamma_\pi+1+in)}{\Gamma(\gamma_\pi+1-in)}\frac{\gamma_\pi-in}{\gamma_\pi+in}e^{i(2\eta_\pi+\pi)}e^{-i(\gamma_\pi-l_\pi)\pi}. \tag{7.5.41}$$

C'の表式は省略しよう．後の応用では規格化をかえ$C'=1$として使う．l_πはπに

† たとえば巻末の[Rose]参照．

応じて j から表 7.1 によって求める．同様にして求めた κ_π から γ_π が定まる．

あるいは，同じことであるが

$$\left.\begin{matrix} G_j^{(\pi)}(r) \\ iF_j^{(\pi)}(r) \end{matrix}\right\} \underset{r\to\infty}{\sim} C\left\{\begin{matrix} \sqrt{(E/mc^2)+1}\cos \\ -i\sqrt{(E/mc^2)-1}\sin \end{matrix}\right\}(kr-n\log 2kr+\beta_j^{(\pi)}) \tag{7.5.42}$$

ただし

$$\beta_j^{(\pi)} = \arg\Gamma(\gamma_\pi+in)-\frac{\gamma_\pi}{2}\pi+\eta_\pi \tag{7.5.43}$$

(7.5.38) の規格化に従えば

$$C = 2N\Gamma(2\gamma_\pi+1)e^{n\pi/2}/|\Gamma(\gamma_\pi+in)|. \tag{7.5.44}$$

η_π と N とは，それぞれ (7.5.36), (7.5.39) に定義されている．(7.5.42) から，もし，これらでつくられる波動関数 $\psi_{k,j,j_3}^{(\pm)}$ を

$$\int\psi_{k',j',j_3'}^{(s')\dagger}(\boldsymbol{r})\psi_{k,j,j_3}^{(s)}(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r} = \delta_{j,j'}\delta_{j_3,j_3'}\delta_{s,s'}\cdot\frac{1}{k^2}\delta(k-k') \tag{7.5.45}$$

のように規格化したいなら，$\sqrt{mc^2/\pi k^2E}/|C|$ を (7.5.38) にかけるべきことがわかる．もし，(7.5.45) の・のあとを $\delta(E-E')$ にしたければ $\sqrt{mc^2/\pi k}/|C|$ をかける

束縛状態の場合と同じく，(7.5.40) の大きい成分 $G_j^{(-)}$ が $\alpha_1\to 0$ で非相対論的の (5.5.18) に漸近する．

(7.5.40) がどんな散乱を意味するか知るには，ポテンシャルなしの自由な波が遠方でどう振舞うかを調べて比較しなければならない．

e)　散乱断面積，スピン偏極

例によって，z 軸の正の向きに走る正エネルギーの平面波 (7.4.23) が入射するものとしよう．方程式 (7.5.1) の解 (7.5.2) で $r\to\infty$ の漸近形が

$$\begin{bmatrix} u^A(\boldsymbol{r}) \\ u^B(\boldsymbol{r}) \end{bmatrix}_{k,s_3} \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} \sqrt{(E/mc^2)+1} & \chi_{s_3} \\ \sqrt{(E/mc^2)-1} & \sigma_3\chi_{s_3} \end{bmatrix} e^{ikz}+f_{k,s_3}(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{7.5.46}$$

となるものを求めると，f_{k,s_3} が散乱振幅になる．これが 4 つの成分をもつことはいうまでもない．ここで，入射粒子のスピンの z 成分を s_3 とし $s_3=1/2, -1/2$ に対して $\chi_{s_3}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$ とする．入射粒子の状態は，エネルギーを正としておけば，波数 k とスピンの z 成分 s_3 とで定まるのである．

Coulomb 散乱の場合，波動関数は遠方でも (7.5.46) の e^{ikz}, e^{ikr}/r になりきらず，ポテンシャルの影響を残しているだろう．われわれは，さきに求めた球面波

解(7.5.16), (7.5.9)を重ね合わせて(7.5.46)に‘相当する’形をつくることを考えよう．以下の議論は，しかし，一般の(短距離)中心力場でもそのまま成り立つのである．

いまの目的には大きい成分 u^A のほうだけ見ておけばよい．小さい成分 u^B は，中心力の場では u^A から(7.5.3)の第1式により完全に定まるからである．

まず，(7.5.46)の入射波の部分を部分波分解しよう．スピンを入れた全角運動量の固有状態に分解するので，(5.4.46)の $P_l(\cos\theta)$ を書きかえて

$$e^{ikz}\chi_{s_3}=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)\cdot\sum_{\pi}\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\mathcal{Y}_{j_\pi,s_3}{}^{(\pi)}\left\langle l\frac{1}{2}j_\pi s_3\middle|l\frac{1}{2}0s_3\right\rangle$$

ただし，$^{(\pi)}$ は $\mathcal{Y}$ の上添字の $^{(\pm)}$ で，これについて和をとる．π に応ずる j の値 j_π は，与えられた l に対して表7.1により定めるのだ．図7.7を参照して l の和を j の和に変えよう．l_π は与えられた j に対して表7.1から定めるものとして

$$e^{ikz}\chi_{s_3}=\sqrt{4\pi}\sum_{j}\sum_{\pi}\sqrt{2l_\pi+1}\,e^{il_\pi\pi/2}j_{l_\pi}(kr)\mathcal{Y}_{j,s_3}{}^{(\pi)}\left\langle l_\pi\frac{1}{2}js_3\middle|l_\pi\frac{1}{2}0s_3\right\rangle. \qquad (7.5.47)$$

したがって，(7.5.46)の入射波の部分の $r\to\infty$ における漸近形は，(5.4.30), (5.4.42)から

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\left(\frac{E}{mc^2}\right)+1}\,re^{ikz}\chi_{s_3}$$
$$\underset{r\to\infty}{\widetilde{}}\sqrt{\left(\frac{E}{mc^2}\right)+1}\frac{\sqrt{2\pi}}{ik}\sum_{j}\sum_{\pi}\sqrt{2l_\pi+1}(e^{i(l_\pi+1)\pi}e^{-ikr}+e^{ikr})\mathcal{Y}_{j,s_3}{}^{(\pi)}\left\langle l_\pi\frac{1}{2}js_3\middle|l_\pi\frac{1}{2}0s_3\right\rangle \qquad (7.5.48)$$

この入射波と入ってくる波の項が合うように Coulomb 場の球面波解(7.5.40)を重ね合わせると，求める散乱状態の解，すなわち(7.5.46)の $u^A(\mathbf{r})$ が得られる．(7.5.40)の比例定数 C' を1とする $G_j{}^{(\pi)}$ の定義をとれば

$$u^A(\mathbf{r})=\sqrt{(E/mc^2)+1}\sum_{j}\sum_{\pi}r^{-1}G_j{}^{(\pi)}(r)\mathcal{Y}_{j,s_3}{}^{(\pi)}\left\langle l_\pi\frac{1}{2}js_3\middle|l_\pi\frac{1}{2}0s_3\right\rangle. \qquad (7.5.49)$$

この解の出てゆく波の項を(7.5.48)の対応する項と比べて，散乱振幅が

$$f_{k,s_3}(\theta,\varphi)$$
$$=\frac{\sqrt{2\pi}}{ik}\sqrt{\frac{E}{mc^2}+1}\sum_{j}\sum_{\pi}\sqrt{2l_\pi+1}(e^{2i\delta_j{}^{(\pi)}}-1)\left\langle l_\pi\frac{1}{2}js_3\middle|l_\pi\frac{1}{2}0s_3\right\rangle\mathcal{Y}_{j,s_3}{}^{(\pi)}(\theta,\varphi) \qquad (7.5.50)$$

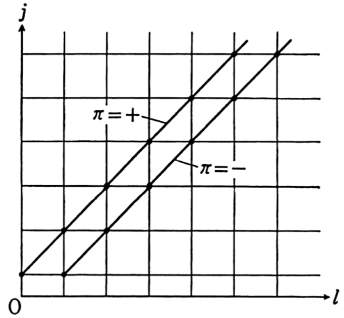


図 7.7　l, j の値と π の $+, -$.

と知れる．この形は一般の中心力場で通用する．

散乱の観測と結びつけるには，これを再び軌道角運動量とスピンとを別々に対角化する表示にもどしたほうがよい．(7.5.50) に $\mathcal{Y}_{j,s_3}{}^{(\pi)}$ を $Y_{l_\pi, s_3-s_3'}\chi_{s_3'}$ の重ね合せで表す式を代入し，図 7.7 を参照して j の和を l の和にもどせば

$$f_{k,s_3}(\theta,\varphi)=\sum_{s_3'}T_{s_3',s_3}(\theta,\varphi)\chi_{s_3'}$$

の形が得られる．ここに

$$T_{s_3',s_3}(\theta,\varphi)=\frac{\sqrt{2\pi}}{ik}\sqrt{\frac{E}{mc^2}+1}\sum_l\sum_\pi\sqrt{2l+1}\,(e^{2i\delta_{j_\pi}{}^{(\pi)}}-1)$$
$$\cdot\left\langle l\,\frac{1}{2}\,s_3-s_3'\,s_3'\middle|l\frac{1}{2}j_\pi s_3\right\rangle\left\langle l\frac{1}{2}j_\pi s_3\middle|l\frac{1}{2}0s_3\right\rangle Y_{l,s_3-s_3'}(\theta,\varphi)$$
$$(7.5.51)$$

は，粒子のスピンが散乱によって s_3 から s_3' になる散乱振幅である．これらを行列にならべて

$$T=\begin{bmatrix}T_{\uparrow\uparrow} & T_{\uparrow\downarrow}\\ T_{\downarrow\uparrow} & T_{\downarrow\downarrow}\end{bmatrix}\equiv\mathfrak{f}+\mathfrak{g}\boldsymbol{n}'\cdot\boldsymbol{\sigma} \qquad (7.5.52)$$

と書くと見やすい．ただし，添字の $s_3=\pm1/2$ を矢印にかえた．$\boldsymbol{n}'$ はある実単位ベクトルであって，上の式は T_{s_3',s_3} という 4 つの複素数を $\mathfrak{f}$ と $\mathfrak{g}_k\equiv\mathfrak{g}n_k'$ $(k=1,2,3)$ という 4 つの複素数で表すものと見ておけばよい．これらが (7.5.51) よりずっと簡単な表式をもつことを示そう．

まず，(7.5.52) の両辺のトレースをとって

$$\mathfrak{f} = \frac{1}{2}(T_{\uparrow\uparrow} + T_{\downarrow\downarrow}).$$

ところが，(7. 5. 51)を定まった l の項で見ると $T_{\uparrow\uparrow}$, $T_{\downarrow\downarrow}$ ともに Y_{l0} に比例し，それらの Clebsch-Gordan 係数は s_3 によらずに

$$\left|\left\langle l\frac{1}{2}0s_3\middle|l\frac{1}{2}j_\pi s_3\right\rangle\right|^2 = \begin{cases} (l+1)/(2l+1) & (\pi=+) \\ l/(2l+1) & (\pi=-) \end{cases} \qquad (7.5.53)$$

となるから

$$\mathfrak{f} = \frac{1}{2ik}\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{E}{mc^2}+1\right)}\sum_l \left[(l+1)(e^{2i\delta_{j_+}^{(+)}}-1)+l(e^{2i\delta_{j_-}^{(-)}}-1)\right]P_l(\cos\theta). \qquad (7.5.54)$$

非相対論的の(5. 4. 50)と比較せよ．

(7. 5. 53)が s_3 によらなかったから

$$\mathfrak{g}_3 = \frac{1}{2}(T_{\uparrow\uparrow} - T_{\downarrow\downarrow}) = 0 \qquad ゆえに \qquad n_3' = 0. \qquad (7.5.55)$$

つぎに，

$$\frac{n_1'+in_2'}{n_1'-in_2'} = \frac{T_{\downarrow\uparrow}}{T_{\uparrow\downarrow}} = -e^{2i\varphi} \qquad (7.5.56)$$

が成り立つ．なぜなら，(7. 5. 51)で l, π を定めて項別に見ると s_3, s_3' による部分——Clebsch-Gordan 係数かける $Y_{l,s_3-s_3'}(\theta,\varphi)$——の $T_{\downarrow\uparrow}/T_{\uparrow\downarrow}$ に相当する比が実は l, π によらず，常に $-e^{2i\varphi}$ に等しいからである．これは

$$\langle lsm_lm_s|lsjm_j\rangle = (-1)^{l+s-j}\langle ls\,-m_l\,-m_s|lsj\,-m_j\rangle$$

と，(4. 2. 21)から知られる

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m e^{2im\varphi}Y_{l,-m}(\theta,\varphi)$$

という恒等式による．前者は，すでに(7. 5. 53)が $s_3=\pm 1/2$ によらないところに顔をだしていた．(7. 5. 55)と(7. 5. 56)は

$$\boldsymbol{n}' = \frac{\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}'}{|\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}'|} \qquad (7.5.57)$$

を示す(図 7. 8)．$\boldsymbol{k}'$ は散乱後の波数ベクトルである．つまり $\boldsymbol{n}'$ は散乱平面の法線になっている．もちろん，これと逆向きにしてもよいが，普通こうとる．

(7. 5. 55)と(7. 5. 56)から $n_1'+in_2'=e^{i(\varphi+\pi/2)}$ となるので

$$\mathfrak{g} = T_{\downarrow\uparrow}e^{-i(\varphi+\pi/2)}.$$

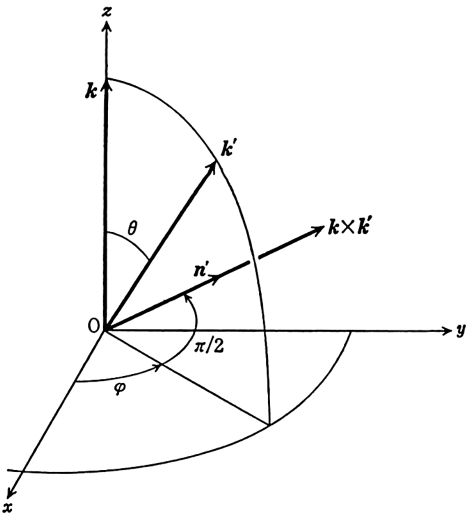


図7.8　散乱平面の単位法線ベクトル $\boldsymbol{n}'$. 散乱の前後の波数ベクトルを $\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}'$ として(7.5.57)によって定義する.

右辺を Clebsch-Gordan 係数を用いて計算すれば

$$\mathfrak{g} = \frac{1}{2ik}\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{E}{mc^2}+1\right)} \sum_l 2i\left[e^{2i\delta_{j+}^{(+)}} - e^{2i\delta_{j-}^{(-)}}\right] P_l^1(\cos\theta). \quad (7.5.58)$$

こうして, (7.5.54)と(7.5.58)によりスピンに関する散乱行列(7.5.52)が位相のずれ $\delta_j^{(\pm)}$ で完全に表された.

散乱断面積は流束の式(7.4.26)を用いて(7.5.46)から計算される. 散乱波は球面波で書かれているが, 遠方で波面の一小部分を見れば平面波と同じことだから(7.4.26)が使えるのだ. 初期状態でスピン s_3 をもっていた粒子が方向 (θ, φ) に散乱されスピンは s_3' になるという散乱の微分断面積は

$$\frac{d\sigma_{s_3', s_3}(\theta, \varphi)}{d\Omega} = |T_{s_3', s_3}(\theta, \varphi)|^2$$

となる.

しかし, 多くの場合, 散乱の初期状態はスピンの確定した'純粋状態'ではない. むしろ, スピンの z 成分が $s_3=1/2$ である確率が $(1+\mathcal{P})/2$, $s_3=-1/2$ である確率が $(1-\mathcal{P})/2$ といった不完全な情報しかない'混合状態'である. 散乱の終状態におこなう観測にしても, スピンの向きまでは問わないことが多い. そのような場合, 散乱断面積としてはスピンの初期状態について平均し, 終状態について和

をとった値が観測されることになる.

そういう状況まで含めて散乱を論ずるには, **密度行列の方法**が便利である. (7.5.52) から一歩すすめて, 行列

$$Q = T\rho_0 T^\dagger \tag{7.5.59}$$

を定義すると, このなかに散乱で何が起こるかの情報が凝縮されるのだ. ただし, ρ_0 はスピンに関して散乱の初期状態を表す密度行列. 初期状態が, たとえば上に記したとおりの混合状態なら $\rho_0 = \dfrac{1}{2}\begin{bmatrix} 1+\mathcal{P} & 0 \\ 0 & 1-\mathcal{P} \end{bmatrix}$ という対角行列である. もっと一般に, ベクトル $\boldsymbol{\mathcal{P}}$ $(0 \leqq \mathcal{P} \leqq 1)$ をあたえて, スピンが $\boldsymbol{\mathcal{P}}$ に平行である確率が $(1+\mathcal{P})/2$, 反平行である確率が $(1-\mathcal{P})/2$ とすれば

$$\rho_0 = \frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\mathcal{P}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \tag{7.5.60}$$

となる. $\boldsymbol{\mathcal{P}} \cdot \boldsymbol{\sigma} / \mathcal{P}$ は $\boldsymbol{\sigma}$ の $\boldsymbol{\mathcal{P}}$ 方向の成分であって, これを対角化する表示で ρ_0 も対角的になり固有値が $(1+\mathcal{P})/2$, $(1-\mathcal{P})/2$ となるからである.

(7.5.59) を用いると, スピンの初期状態が密度行列 (7.5.60) で与えられるとき, スピンの終状態の如何を問わない観測で得られる微分断面積は

$$\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} = \mathrm{tr}\,[T\rho_0 T^\dagger] \tag{7.5.61}$$

となる. 事実, この式の左辺は, もし ρ_0 が対角形だったら

$$\frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} = \frac{1}{2} \sum_{s_3'} \{(1+\mathcal{P}) |T_{s_3'\uparrow}|^2 + (1-\mathcal{P}) |T_{s_3'\downarrow}|^2\}$$

というもので, (7.5.61) の右辺を計算してみると確かにこれに等しい. 対角形でない ρ_0 の場合にも, これを対角化する表示にうつすと T が同じユニタリー変換をうけるので, やはり (7.5.61) が成り立つ.

$\boldsymbol{n}$ を与えられた実単位ベクトルとして, $\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$ の平均を $\boldsymbol{n}$ 方向の**偏極度**という. 散乱の終状態について, これが知りたければ

$$\langle \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \rangle = \mathrm{tr}\,[(\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) T\rho_0 T^\dagger] / \mathrm{tr}\,[T\rho_0 T^\dagger] \tag{7.5.62}$$

を計算すればよい.

とくに, 初期状態のスピンに偏りがない $\rho_0 = \dfrac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ の場合には, (7.5.52), (7.5.54) から

$$\frac{d\sigma(\theta,\varphi)}{d\Omega}=|\mathfrak{f}(\theta)|^2+|\mathfrak{g}(\theta)|^2. \qquad (7.5.63)$$

これは対称性から期待されるとおり θ のみにより，φ によらない．また

$$\langle \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\rangle=\frac{2\,\mathrm{Re}\,\{\mathfrak{f}(\theta)\mathfrak{g}(\theta)^*\}}{|\mathfrak{f}(\theta)|^2+|\mathfrak{g}(\theta)|^2}\boldsymbol{n}\cdot\frac{\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}'}{|\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}'|}. \qquad (7.5.64)$$

よって，偏極度が最大になるのは $\boldsymbol{n}$ を散乱平面に垂直にとったときだ(図7.9)．これは，この方向のスピン成分を対角化する表示で終状態のスピン密度行列が対角的になることを意味しているから，終状態のスピンは散乱平面に垂直に偏極していると言ってよい．偏極度は $2\,\mathrm{Re}\,\{\mathfrak{f}(\theta)\mathfrak{g}(\theta)^*\}/\{|\mathfrak{f}(\theta)|^2+|\mathfrak{g}(\theta)|^2\}=\mathcal{P}$ である．偏極の方向に関するこの結果は空間反転に関する対称性から理解できることで(図7.9)，もちろん，球対称なポテンシャルによるスピンをもった粒子の散乱について一般的に成り立つ．

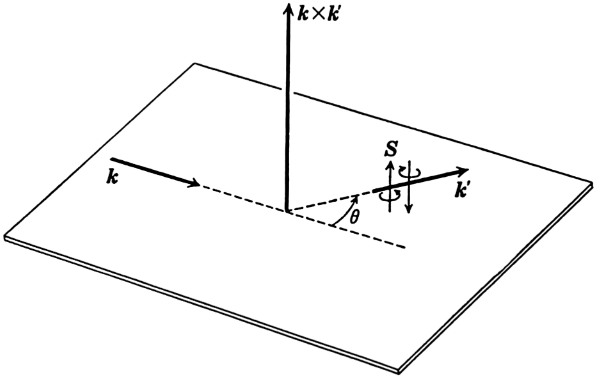


図7.9 散乱によるスピンの偏極．この配位を鏡にうつしたらどう見えるか？

Coulomb 散乱の場合，散乱の微分断面積(7.5.63)を解析的に閉じた形に書くことはできないので，近似式や数値的な結果がいろいろだされている．ここには，それを $\alpha_1=ZZ'e^2/\hbar c$ と $\beta=v/c$ に関する級数に展開した McKinley-Feshbach の式

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\mathrm{R}}\cdot\left[1-\beta^2\sin^2\frac{\theta}{2}-\pi\alpha_1\beta\sin\frac{\theta}{2}\left(1-\sin\frac{\theta}{2}\right)\right] \qquad (7.5.65)$$

を記しておこう．ここに

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\mathrm{R}}=\left(\frac{ZZ'e^2}{2mc^2}\right)^2\frac{1-\beta^2}{\beta^4}\frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \qquad (7.5.66)$$

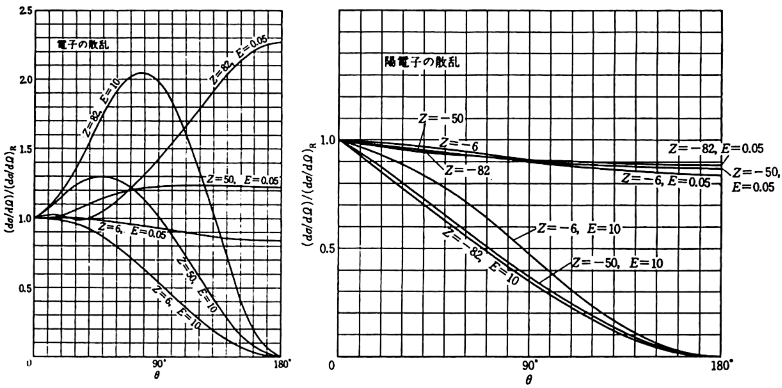


図 7.10 Dirac 粒子の Coulomb 散乱の微分断面積 $(d\sigma/d\Omega)$ と Rutherford の微分断面積(*7.5.66*)の比をいろいろのエネルギー E (MeV) と Z の場合に示す. $Z'=-1$ としたので $Z>0$ は電子の散乱, $Z<0$ は陽電子の散乱. J. A. Doggett と L. V. Spencer の数値計算の結果(*Phys. Rev.* **103**, 1597(1956))をグラフにした.

は Rutherford の微分断面積である. (*7.5.65*)は, α_1 さえ小さければ, どんな β に対しても使える. さらに図 7.10 には Z や β の大きい場合も含めて $(d\sigma/d\Omega)$ と $(d\sigma/d\Omega)_{\rm R}$ の比を数値計算した結果を示す.

なお, 散乱振幅やスピン偏極に関する結果については, 巻末の文献 [Bethe], [Rose] に引用されている論文を見ていただく.

§7.6 Hamilton 形式

これまでに扱ってきた Dirac 方程式(*7.5.1*)を, 量子力学で標準的な Schrödinger 方程式 $i\hbar\partial\psi/\partial t=H\psi$ の形にひきなおそう. そうすれば, Dirac 理論を Heisenberg 描像で見直す道がひらけるばかりでなく, 非相対論的の極限も見やすくなるだろう.

a) Zitterbewegung

自由粒子の場合からはじめよう. Dirac 方程式(*7.4.2*)に左から γ^0 をかけて整理すると

$$i\hbar\partial\psi/\partial t = H\psi, \qquad H = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\beta mc^2. \tag{7.6.1}$$

この H をハミルトニアンとみることができる. ただし, $\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\,\mathrm{grad}$ であり,

$$\boldsymbol{\alpha} \equiv \gamma^0\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta \equiv \gamma^0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \tag{7.6.2}$$

であって,

$$\alpha_k\alpha_l+\alpha_l\alpha_k = 2\delta_{kl}, \qquad \alpha_k\beta+\beta\alpha_k = 0, \qquad \beta^2 = 1 \tag{7.6.3}$$

が成り立つ.

Heisenberg 描像にうつって保存量を調べておこう. 自由粒子を考えているので, 運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar\,\mathrm{grad}$ はハミルトニアン H と交換し, 保存量である. Dirac 粒子のスピン $\boldsymbol{S}$ は(7.4.19)の空間成分であったが, $\boldsymbol{\alpha}$ 行列で書けば

$$\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}, \qquad \Sigma_k \equiv \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix} = -\frac{i}{2}\varepsilon_{klm}\alpha_l\alpha_m \tag{7.6.4}$$

となり

$$[H, S_k] = ic\hbar\varepsilon_{klm}\alpha_l\hat{p}_m \qquad \text{すなわち} \qquad \dot{\boldsymbol{S}} = c\hat{\boldsymbol{p}}\times\boldsymbol{\alpha} \tag{7.6.5}$$

なので, スピンは運動量方向の成分 $\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/|\hat{\boldsymbol{p}}|$ (ヘリシティ)のほか保存しない. ただし, $|\hat{\boldsymbol{p}}|=\sqrt{\hat{\boldsymbol{p}}^2}$. 全角運動量 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}+\boldsymbol{S}$ の保存は容易に確かめられる.

行列 $\boldsymbol{\alpha}$ には物理的な意味がつく. 実際, Dirac 粒子の速度が

$$\dot{\boldsymbol{r}} = (i\hbar)^{-1}[\boldsymbol{r}, H] = c\boldsymbol{\alpha} \tag{7.6.6}$$

となるのである. これは流束(7.4.12)の空間部分が $\psi^\dagger\alpha_k\psi$ であることに符合している. しかし, 速度が運動量と切り離されたことも見逃せない. $\boldsymbol{\alpha}$ の成分は互いに交換しないから同時に対角化できない. これは自由な Dirac 粒子でも速度にゆらぎがあって直線運動ができないことを意味している. $\boldsymbol{\alpha}$ の任意の 1 成分を対角化すると固有値は ±1 だから, 自由な Dirac 粒子について勝手に選んだ方向の速度成分を観測すると, 常に $+c$ または $-c$ という値が得られることになる. 速度の大きさ $\sqrt{\dot{\boldsymbol{r}}^2}$ をつくると恒等的に $\sqrt{3}\,c$ に等しい. これは Hermite 的だが, 何かの理由で観測量でないのだろう.

Dirac 自由粒子の運動

$$\boldsymbol{r}(t) = e^{iHt/\hbar}\boldsymbol{r}(0)e^{-iHt/\hbar} \tag{7.6.7}$$

を立ち入って調べてみよう. (7.6.3)により $H^2=c^2\hat{\boldsymbol{p}}^2+m^2c^4$ となり, これは正定値だから平方根を $|H|$ と記せば

$$e^{-iHt/\hbar} = \cos\frac{|H|t}{\hbar}-i\frac{H}{|H|}\sin\frac{|H|t}{\hbar}.$$

これが

$$e^{-iHt/\hbar} = e^{-i|H|t/\hbar} + i\left(1-\frac{H}{|H|}\right)\sin\frac{|H|t}{\hbar} = e^{i|H|t/\hbar} - i\left(1+\frac{H}{|H|}\right)\sin\frac{|H|t}{\hbar} \tag{7.6.8}$$

の2通りに書けることに注意しよう．正準交換関係から

$$e^{i|H|t/\hbar}\boldsymbol{r}(0)e^{-i|H|t/\hbar} = \frac{\boldsymbol{p}}{|H|}t + \boldsymbol{r}(0) \quad (\equiv \boldsymbol{r}_0(t) \text{ とおく}) \tag{7.6.9}$$

となるから，$|H|$ の生成する運動 $\boldsymbol{r}_0(t)$ は相対論的な力学でおなじみのものである．この $|H|$ を (7.6.8) の第2の形にあわせて $-|H|$ にかえると負エネルギー粒子の運動ということになるが，上の式の $\boldsymbol{p}t/|H|$ が $-\boldsymbol{p}t/|H|$ にかわり，走る向きが運動量と反対になる．その解釈は後の問題としよう．

(7.6.8) は，(7.6.9) の $\boldsymbol{r}_0(t)$ が Dirac 自由粒子の運動のすべてではないことを示している．正エネルギー粒子の場合を考えて (7.6.8) の第1の形を使えば

$$\boldsymbol{r}(t) \equiv e^{iHt}\boldsymbol{r}(0)e^{-iHt} = \boldsymbol{r}_0(t) + \boldsymbol{r}_Z(t). \tag{7.6.10}$$

ここに，負エネルギー状態への射影演算子の2倍 $1-H/|H|$ を P とおいて†

$$\boldsymbol{r}_Z(t) \equiv -iP\sin\frac{|H|t}{\hbar}\boldsymbol{r}(0)e^{-i|H|t/\hbar} + ie^{i|H|t/\hbar}\boldsymbol{r}(0)\sin\frac{|H|t}{\hbar}P$$
$$+P\sin\frac{|H|t}{\hbar}\boldsymbol{r}(0)\sin\frac{|H|t}{\hbar}P. \tag{7.6.11}$$

この異常な付加分 $\boldsymbol{r}_Z(t)$ は，各項に P が掛かっているので，Dirac 方程式の正エネルギー解 (7.4.27) の間には行列要素をもたない．そのため正エネルギー解のみ重ね合わせた波束 ψ_+ での期待値は $\langle\psi_+, \boldsymbol{r}_Z(t)\psi_+\rangle \equiv \langle\boldsymbol{r}_Z(t)\rangle_+ = 0$ となり，この波束で表した粒子の位置は平均においてまったく普通の運動をする：

$$\langle\boldsymbol{r}(t)\rangle_+ = \langle\boldsymbol{r}_0(t)\rangle_+ = \langle\boldsymbol{p}/|H|\rangle_+ t + \langle\boldsymbol{r}(0)\rangle_+ \tag{7.6.12}$$

では，位置のゆらぎはどうか．ゆらぎというのは $\langle[\boldsymbol{r}(t)-\langle\boldsymbol{r}(t)\rangle_+]^2\rangle_+$ であって，

$$\boldsymbol{r}(t)^2 = \boldsymbol{r}_0(t)^2 + \boldsymbol{r}_0(t)\cdot\boldsymbol{r}_Z(t) + \boldsymbol{r}_Z(t)\cdot\boldsymbol{r}_0(t) + \boldsymbol{r}_Z(t)^2$$

の期待値 $\langle\boldsymbol{r}(t)^2\rangle_+$ と $\langle\boldsymbol{r}(t)\rangle_+{}^2$ の差に等しい．そのうち

$$\Delta_0(t) \equiv \langle\boldsymbol{r}_0(t)^2\rangle_+ - \langle\boldsymbol{r}(t)\rangle_+{}^2 = \langle\boldsymbol{r}_0(t)^2\rangle_+ - \langle\boldsymbol{r}_0(t)\rangle_+{}^2 \tag{7.6.13}$$

は波束の普通の拡がりと解釈されよう．明らかに

$$\Delta_Z(t) \equiv \langle\boldsymbol{r}_Z(t)^2\rangle_+ = 0 \tag{7.6.14}$$

† $\boldsymbol{r}_Z(t)$ は座標原点の移動 $\boldsymbol{r}(0)\to\boldsymbol{r}(0)+\boldsymbol{a}$ ($\boldsymbol{a}$ は c 数ベクトル) をしても不変である．

なので，残るのは $\boldsymbol{r}_{\mathrm{O}}(t)$ と $\boldsymbol{r}_{\mathrm{Z}}(t)$ との相関を表す項

$$\Delta_{\mathrm{corr}}(t) = \langle \boldsymbol{r}_{\mathrm{O}}(t)\cdot\boldsymbol{r}_{\mathrm{Z}}(t) + \boldsymbol{r}_{\mathrm{Z}}(t)\cdot\boldsymbol{r}_{\mathrm{O}}(t)\rangle_+$$

である．この期待値が消えないのは，$\boldsymbol{r}_{\mathrm{O}}(t)\cdot\boldsymbol{r}_{\mathrm{Z}}(t)$ のほうでいうと

$$\boldsymbol{r}_{\mathrm{O}}(t)P = P\boldsymbol{r}_{\mathrm{O}}(t) + [\boldsymbol{r}_{\mathrm{O}}(t), P]$$

の右辺第2項から P が消えるからであって，実際

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{r}_{\mathrm{O}}(t), P] &= e^{i|H|t/\hbar}[\boldsymbol{r}(0), P]e^{-i|H|t/\hbar} \\ &= i\frac{c\hbar}{|H|}\left(-\boldsymbol{\alpha} + \frac{c\boldsymbol{p}H}{|H|^2}\right) = [\boldsymbol{r}(0), P].\end{aligned} \qquad (7.6.15)$$

したがって

$$\langle \boldsymbol{r}_{\mathrm{O}}(t)\cdot\boldsymbol{r}_{\mathrm{Z}}(t)\rangle_+ = -i\left\langle [r_k(0), P]\sin\frac{|H|t}{\hbar}r_k(0)e^{-i|H|t/\hbar}\right\rangle_+$$

と書いておくことができる．r_k はベクトル $\boldsymbol{r}$ の第 k 成分．右辺は $k=1,2,3$ にわたり和をとる．(7.6.15) は $|H|$ と交換するから $\sin(|H|t/\hbar)$ を $[r_k(0), P]$ の左に移すことができ，そうしたとき，$[r_k(0), P]r_k(0) = r_k(0)Pr_k(0) - Pr_k(0)r_k(0)$ の第2項は，P が $\sin(|H|t/\hbar)$ の左にもどせるので，期待値に寄与しない．よって

$$\langle \boldsymbol{r}_{\mathrm{O}}(t)\cdot\boldsymbol{r}_{\mathrm{Z}}(t)\rangle_+ = -i\left\langle \sin\frac{|H|t}{\hbar}r_k(0)Pr_k(0)e^{-i|H|t/\hbar}\right\rangle_+. \qquad (7.6.16)$$

さらに計算をすすめるには，$r_k(0)Pr_k(0)$ を $\dfrac{1}{2}[[r_k(0), P], r_k(0)]$ でおきかえても期待値が変わらないことに注意するのがよい．この二重交換子は (7.6.15) から容易に計算され

$$\frac{1}{2}[[r_k(0), P], r_k(0)] = \frac{c^2\hbar^2}{|H|^2}\left[\frac{c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}}{|H|} + \frac{3}{2}\frac{(mc^2)^2H}{|H|^3}\right]. \qquad (7.6.17)$$

この演算子の正エネルギー自由粒子解に関する行列要素は (7.4.26) を用いて得られる．この演算子は $|H|$ と交換するので (7.6.16) の $\sin(|H|t/\hbar)$ と $e^{-i|H|t/\hbar}$ を片側に集めることができ，$\langle \boldsymbol{r}_{\mathrm{Z}}(t)\cdot\boldsymbol{r}_{\mathrm{O}}(t)\rangle_+$ はその複素共役だから，加えて

$$\Delta_{\mathrm{corr}}(t) = -\left\langle \sin\frac{|H|t}{\hbar}r_k(0)Pr_k(0)\sin\frac{|H|t}{\hbar}\right\rangle_+ \qquad (7.6.18)$$

の形にすることができる．これは明らかに負である．$\boldsymbol{r}_{\mathrm{O}}(t)$ と $\boldsymbol{r}_{\mathrm{Z}}(t)$ の間に負の相関が見出されたことは興味ふかい．粒子の位置のゆらぎでいえば，Dirac 粒子の

場合，この相関分だけ波束の普通の拡がり(7.6.13)より小さいという結論になる．

相関 Δ_{corr} が時間とともに変動するのは $\boldsymbol{r}_{\mathrm{Z}}(t)$ の振動による．Dirac 粒子の運動に対するこの振動的な付加分 $\boldsymbol{r}_{\mathrm{Z}}(t)$ を **Zitterbewegung** (震え運動)とよぶ．震えの角振動数は少なくとも $2mc^2/\hbar$ であり，これは電子の場合 $1/(2\times10^{-22}(\mathrm{sec}))$．もし低エネルギー $\boldsymbol{p}^2/2m\ll mc^2$ の波束にかぎれば(7.6.17)の第1項は省略できるから，震えの振幅は Compton 波長 $\hbar/mc$ の程度と見積もられ，電子の場合なら $\hbar/mc=3.9\times10^{-11}(\mathrm{cm})$ である．

この震え運動は，あまりにはやすぎて，尋常の観測手段ではつかまえられないだろう．よほど特別の観測をしないかぎり，Dirac 粒子の運動も普通の(7.6.12)のように見えるだろう．

だからといって，Zitterbewegung を無視し去ることはできない．Dirac 粒子の角運動量が軌道運動の分だけでは保存しないことを注意したが，これは Zitterbewegung のせいである．また，点電荷の Zitterbewegung が電子などのもつスピン磁気能率のもとになっていることも証明することができる．

さきの議論での平均値 $\langle\ \ \rangle_+$ は自由粒子の正エネルギー解のみ重ね合わせた波束に関するものであった．もし波束が負エネルギー成分を含めば $\boldsymbol{r}_{\mathrm{Z}}(t)$ の平均値は消えない．そして事実，Dirac 粒子がポテンシャルの場を運動するときには，波動関数を自由粒子解で展開してみると多かれ少なかれ負エネルギー成分が含まれている．読者は，このことを§7.5で調べた Coulomb 場における電子のエネルギー固有状態について確かめよ．

そこで正エネルギー成分 ψ_+ に加えてわずかに負エネルギー成分 ψ_- を含む低エネルギーの波束 $\psi=\psi_++\psi_-$ をとり，(7.6.11)の期待値を計算してみよう．そのうちで $\langle\psi_-, \boldsymbol{r}_{\mathrm{Z}}(t)\psi_-\rangle$ は小さいから省略すると，残るのは $\langle\psi_-$, (第1項)$\psi_+\rangle$, $\langle\psi_+$, (第2項)$\psi_-\rangle$ である．前者の行列要素は

$$(\text{第1項}) = -(i/2)\sin(|H|t/\hbar)\,[\boldsymbol{r}, H/|H|]e^{-i|H|t/\hbar}$$

として計算してよい．さらに

$$[\boldsymbol{r}, H|H|^{-1}] = [\boldsymbol{r}, H]|H|^{-1}+H[\boldsymbol{r}, |H|^{-1}]$$

は，$|H|=(c^2p^2+m^2c^4)^{1/2}$ に注意すれば，$\boldsymbol{r}$ との交換関係が $i\hbar\partial/\partial\boldsymbol{p}$ によって求められるので

$$[\boldsymbol{r}, H/|H|] = i\hbar(c\boldsymbol{\alpha}|H|^{-1} - c^2\boldsymbol{p}H|H|^{-3}).$$

したがって,

$$\langle\psi_-, (\text{第 1 項})\psi_+\rangle = \frac{\hbar}{2i}\left\langle\psi_-, \frac{c\boldsymbol{\alpha}}{|H|}(1-e^{-2i|H|t/\hbar})\psi_+\right\rangle$$

この右辺には, ψ_+, ψ_- を(*7. 4. 27*), (*7. 4. 28*)の自由粒子の解 $u^{(s)}, u^{(s')}$ で展開したとき($s=1, 2,\ \ s'=3, 4$)運動量変化なしの行列要素

$$\langle u^{(s')}(\boldsymbol{p}), \boldsymbol{\alpha}u^{(s)}(\boldsymbol{p})\rangle = \frac{|E|}{mc^2}\langle\chi_{s_3'}, \boldsymbol{\sigma}\chi_{s_3}\rangle - \frac{c^2\boldsymbol{p}}{mc^2(|E|+mc^2)}\langle\chi_{s_3'}, \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\sigma}\chi_{s_3}\rangle \tag{7.6.19}$$

しかきかない. そして, この第2項は低エネルギーの波束では省略できる. ここに s_3, s_3' はそれぞれ ψ_+, ψ_- の自由粒子成分波のスピンの3軸成分である. こうして $\langle\psi_-, (\text{第 1 項})\psi_+\rangle$ が計算された. $\langle\psi_+, (\text{第 2 項})\psi_-\rangle$ は, これの共役複素数になるので

$$\langle\psi, \boldsymbol{r}_Z(t)\psi\rangle \cong \frac{\hbar}{mc}\cdot\mathrm{Im}\,\langle\psi_-, \boldsymbol{\Sigma}(1-e^{-2i|H|t/\hbar})\psi_+\rangle \tag{7.6.20}$$

ここに, $\boldsymbol{\Sigma}$ は(*7. 6. 4*)のスピン演算子である. 低エネルギー波束では $|H|\cong mc^2$ としてよいから, $\langle\psi_-, \boldsymbol{\Sigma}\psi_+\rangle = \boldsymbol{a}e^{ib}$ とおくと($\boldsymbol{a}, b$ は実数)

$$\langle\psi, \boldsymbol{r}_Z(t)\psi\rangle = \frac{\hbar}{mc}\cdot\boldsymbol{a}\left[\sin b - \sin\left(\frac{2mc^2}{\hbar}t - b\right)\right] \tag{7.6.21}$$

これは再び Compton 波長くらいの振幅をもち, 角振動数が $2mc^2/\hbar$ という激しい振動である. ただし, ψ_+ と ψ_- の位相関係により, いくらかの定数成分がある. 水素原子のエネルギー固有関数について $\boldsymbol{a}, b$ を定めてみることを読者の演習問題としよう.

Dirac 粒子の速度(*7. 6. 6*)の固有状態には不可避的に自由粒子の負エネルギー状態が混入する. これが速度の固有値を光速にする原因である.

後に c) 項で述べる谷-Foldy-Wouthuysen 変換 U を介して Dirac 粒子の位置座標を

$$\boldsymbol{R} = U\boldsymbol{r}U^{-1}$$

と定義する考え方もある. これは時間変化において Zitterbewegung を含まないが, $\boldsymbol{r}$ で見ると Compton 波長くらいの拡がりをもっている. T. D. Newton と E. P. Wigner は相対論的な粒子の位置概念を公理論的に分析して, この $\boldsymbol{R}$ と同

等な表式を得た(1949).

b) 電磁場との相互作用

自由 Dirac 粒子のハミルトニアン(*7.6.1*)に電磁場との相互作用を入れるには，非相対論的の場合に(*5.6.1*)でしたように，電磁ポテンシャル$(\boldsymbol{A}, \Phi)$を導入して$c\hat{\boldsymbol{p}}\to c\hat{\boldsymbol{p}}-e\boldsymbol{A}$, $H\to H-e\Phi$ のおきかえをすればよい．その結果

$$H=\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\hat{\boldsymbol{p}}-e\boldsymbol{A})+e\Phi+\beta mc^2. \tag{7.6.22}$$

この処方は，自由粒子のハミルトニアン(*7.6.1*)を与えるラグランジアンを Lorentz 変換とゲージ変換に関する不変性を保ちながら変更するという原理から得られる．(*7.6.22*)の相互作用項を minimal な相互作用とよぶこともあるが，それは上の原理に従いつつ Pauli 項とよばれる $S^{kl}F_{kl}$ $(F_{kl}\equiv\partial A_l/\partial x^k-\partial A_k/\partial x^l)$ を付け加える余地があるからである．Coulomb 場における運動を扱うために用いた(*7.5.1*)は，ハミルトニアン形式にすれば(*7.6.22*)で $\boldsymbol{A}=0$ とおいた特別の場合にあたる．

電磁場における運動を Heisenberg 描像で調べてみよう．座標の時間変化，すなわち速度は(*7.6.6*)と同じく

$$\dot{\boldsymbol{r}}=(i/\hbar)[H, \boldsymbol{r}]=c\boldsymbol{\alpha} \tag{7.6.23}$$

となる．運動量については，いわゆる力学的運動量$\boldsymbol{\pi}\equiv\boldsymbol{p}-(e/c)\boldsymbol{A}$ に対して

$$\dot{\boldsymbol{\pi}}=(i/\hbar)[H, \boldsymbol{\pi}]+\partial\boldsymbol{\pi}/\partial t=e(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{B}) \tag{7.6.24}$$

が成り立つ．$\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B}$ は$(\boldsymbol{A}, \Phi)$から導びかれる電場と磁場である．$c\boldsymbol{\alpha}$ を速度とすれば最右辺は Lorentz 力とみられるが，相対論的な古典力学に従うなら力は $\dot{\boldsymbol{\pi}}$ にではなく正準運動量の変化率 $\dot{\boldsymbol{p}}$ に等しかるべきであった．ここにも $c\boldsymbol{\alpha}$ の速度としての異常さが現れている．

まえに(*7.3.7*)で時間反転に対するスピノルの変換の一案を述べた．それは電磁場のある場合には使えないので，注意しておきたい．Schrödinger 描像にもどって，方程式†

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=[\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\hat{\boldsymbol{p}}-e\boldsymbol{A})+e\Phi+\beta mc^2]\psi(t) \tag{7.6.25}$$

でいえば，$t'=-t$ としたとき適当な変換 T があって $\psi'(t')=T\psi(t)$ が同じ形の方程式を満たす場合に，この力学系は時間反転に関する対称性をもつというのだ

† ψ の $\boldsymbol{r}$ 依存性を明示することは省く．

った．ただし，§5.3でしたように，電磁場も同時に

$$A'(x') = -A(x), \qquad \Phi'(x') = \Phi(x) \tag{7.6.26}$$

と変換するものとする．これでちょうど電荷密度が変わらず電流の向きが逆になったときの場 $E'(x') = E(x)$，$B'(x') = -B(x)$ が得られるのだ．

(7.6.25)にこの変換をほどこすと，あとの便宜のため T を T_0 と書いて

$$i\hbar\frac{\partial}{-\partial t'}\psi'(t') = T_0[\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\hat{p}+eA')+e\Phi'+\beta mc^2]T_0^{-1}\psi'(t'). \tag{7.6.27}$$

これが(7.6.25)と同じ形の方程式になるように T_0 が選べるだろうか．そして，その T_0 は物理的にみても状態 $\psi(t)$ を時間反転したといえるような $\psi'(t')$ を与えるか．

まえの(7.3.7)は，Dirac スピノルの変換

$$T_0 = \begin{bmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{bmatrix}, \qquad T_0^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{bmatrix} \tag{7.6.28}$$

を意味している．$T_0 = -i\alpha_1\alpha_2\alpha_3\beta$ とも書ける．これをとれば

$$T_0\boldsymbol{\alpha}T_0^{-1} = -\boldsymbol{\alpha}, \qquad T_0\beta T_0^{-1} = -\beta$$

となるから，電磁場との相互作用がなかったら(7.6.27)はたしかに(7.6.25)と同じ形である．電磁場までいれると，(7.6.27)は(7.6.25)で $e\to -e$ とした形になる．

電磁場のある場合は，時間反転の変換を

$$T = i\alpha_1\alpha_3\times(\text{複素共役}) \qquad (i\alpha_1\alpha_3 = \Sigma_2) \tag{7.6.29}$$

とすればよい(**Wignerの時間反転**)．波動関数でいえば $T\psi = i\alpha_1\alpha_3\psi^*$，観測量 A でいえば $TAT^{-1} = (-i\alpha_1\alpha_3)A^*(i\alpha_3\alpha_1)$ である†．実際，(7.6.25)の複素共役をとると，

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(t) = [\boldsymbol{\alpha}^*\cdot(-c\hat{p}-eA)+e\Phi+\beta mc^2]\psi^*. \tag{7.6.30}$$

$\boldsymbol{\alpha}$ の複素共役をとると(7.6.2)により α_2 だけ符号が変わる．しかし，$i\alpha_1\alpha_3$ が他の成分の符号を変え

$$T\boldsymbol{\alpha}^*T^{-1} = -\boldsymbol{\alpha}, \qquad T\beta T^{-1} = \beta \tag{7.6.31}$$

とするので，(7.6.30)に $i\alpha_1\alpha_3$ をかけて変換 T を完成すれば，$-i\hbar\partial/\partial t = i\hbar\partial/\partial t'$

---

† ＊印は複素共役を表す．

と電磁場の変換(7.6.26)により，たしかに，もとの(7.6.25)と同じ形になる．$i\alpha_1\alpha_3=\Sigma_2$ なので(7.6.29)は(5.3.8)にあっている．T 変換(7.6.29)は，(7.6.31)から Dirac 粒子の速度を逆向きに変え，運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}=-i\hbar$ grad も逆向きにする．さらに(7.6.4)のスピンも逆向きにすることがわかる．他方，座標 $\boldsymbol{r}$ は変えない．これはたしかに時間反転の名にふさわしい変換である．読者は自由 Dirac 粒子の解(7.4.27)，(7.4.28)に対する T の作用を調べよ．また Lorentz 変換(7.4.4)，(7.4.5)などを T で変換したらどうなるか．

c) 谷-Foldy-Wouthuysen 変換

Dirac 粒子の波動関数が 4 成分をもつのは，スピン 1/2 の自由度とエネルギーの正負という自由度とに照応している．とすれば，エネルギーの正負が確定した状態では 4 成分のうち半分だけが独立なはずであろう．実際，自由粒子のエネルギー固有関数(7.4.27)は上の 2 成分から下の 2 成分が定まる形をしている．中心力場の問題でも(7.5.10)から同じことがいえる．そして，いずれの場合にも低エネルギーでは上の 2 成分が圧倒的に大きい．負の‘低エネルギー’では下の 2 成分が圧倒的になるのだから，象徴的に上の 2 成分を‘正エネルギー成分’といい下の 2 成分を‘負エネルギー成分’といってもよいであろう．

そこで，Dirac 理論を正エネルギーの 2 成分のみ扱えばよい形に変換することを考えよう．それができれば，スピンの自由度がエネルギーの正負の自由度から切り離してとりだされることになり，Dirac 理論を古典的描像にひきつけて解釈することも容易になるのではないか．

自由粒子の場合は簡単である．そのハミルトニアン

$$H=\beta mc^2+c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \tag{7.6.32}$$

のうち波動関数の正エネルギー成分と負エネルギー成分を結ぶ演算子——奇の演算子という——は(7.6.2)より $\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$ だから，これを消去して，2 つの成分を結ばない演算子——偶の演算子という——だけにしよう．それには，変換

$$U(\theta)=e^{(\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\theta}$$

が次のような‘回転’をおこすことに注意すればよい．すなわち，θ は c 数なみに扱うとして，(7.6.3)より

$$\frac{d}{d\theta}U\beta U^{-1}=U[\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}},\beta]U^{-1}=-2U\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}U^{-1}$$

$$\frac{d}{d\theta}U\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}U^{-1} = U[\beta\alpha_k p_k, \alpha_l p_l]U^{-1} = U2\hat{\boldsymbol{p}}^2\beta U^{-1}$$

となるから，$\sqrt{\hat{\boldsymbol{p}}^2}\equiv|\hat{\boldsymbol{p}}|$ とおけば，U は $[|\hat{\boldsymbol{p}}|\beta, \boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}]$ の世界に回転

$$U\begin{bmatrix}|\hat{\boldsymbol{p}}|\beta \\ \boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\end{bmatrix}U^{-1} = \begin{bmatrix}\cos 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta & -\sin 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta \\ \sin 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta & \cos 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}|\hat{\boldsymbol{p}}|\beta \\ \boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\end{bmatrix} \tag{7.6.33}$$

をひきおこす．よって

$$UHU^{-1} = \beta mc^2\left(\cos 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta+\frac{|\hat{\boldsymbol{p}}|}{mc}\sin 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta\right)+c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\left(\cos 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta-\frac{mc}{|\hat{\boldsymbol{p}}|}\sin 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta\right).$$

奇の演算子 $\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$ を消すには，だから，θ を

$$\tan 2|\hat{\boldsymbol{p}}|\theta = |\hat{\boldsymbol{p}}|/mc \tag{7.6.34}$$

と選べばよい．この θ は $|\hat{\boldsymbol{p}}|$ の関数だから $\boldsymbol{\alpha}, \beta$ と交換するので，上の計算で c 数なみに扱ったことに問題はない．この θ に対して

$$H' \equiv UHU^{-1} = \beta\sqrt{(mc^2)^2+c^2\hat{\boldsymbol{p}}^2}. \tag{7.6.35}$$

となり，変換 U によって上下の成分の分離が達成され，β の形(7.6.2)から，これは正・負のエネルギーへの分離になっている．$(\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\theta)^\dagger=-\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\theta$ だから，U はユニタリー変換である．

これを電磁場との相互作用のはいった(7.6.22)にまで拡張したい．厳密な計算は望むべくもないから，$\varepsilon\equiv$(運動エネルギー)$/mc^2\ll 1$ の場合に限って，ε について逐次近似をしよう．その際，電磁場による粒子のエネルギーへの付加分は運動エネルギーと同程度であると考えておく(Virial 定理 !).

問題のハミルトニアン(7.6.22)を

$$H = \beta mc^2+\mathcal{E}+\mathcal{O}, \qquad \mathcal{E}\equiv e\Phi, \qquad \mathcal{O}\equiv\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\hat{\boldsymbol{p}}-e\boldsymbol{A}) \tag{7.6.36}$$

と書いておこう．$\mathcal{O}$ が消去すべき奇の演算子で，$\mathcal{O}/mc^2=O(\varepsilon^{1/2})$．そして $\mathcal{E}$ は偶である．(7.6.34)は $|\hat{\boldsymbol{p}}|\ll mc$ なら $\theta=1/2mc$ を与えるから，先例にならって

$$U = e^S, \qquad S\equiv\beta\mathcal{O}/2mc^2 \tag{7.6.37}$$

を試みる．この S は一般に時間にあらわに依存するので，$\psi'=e^S\psi$ と変換するとき

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = i\hbar\left[\frac{\partial e^S}{\partial t}\psi+e^S\frac{\partial\psi}{\partial t}\right] = \left[i\hbar\frac{\partial e^S}{\partial t}e^{-S}+e^SHe^{-S}\right]\psi'.$$

つまり，ψ' の運動をきめるハミルトニアンは

$$H' = i\hbar\frac{\partial e^S}{\partial t}e^{-S}+e^S He^{-S} \tag{7.6.38}$$

である．さきにいった ε に関するベキ展開は $\mathcal{O}$ に関する展開となり，したがって S に関する展開になる．それは，(3.2.12) などの公式

$$e^S He^{-S} = H+[S, H]+\frac{1}{2!}[S, [S, H]]+\cdots$$

$$\frac{\partial e^S}{\partial t}e^{-S} = \frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2!}\left[S, \frac{\partial S}{\partial t}\right]+\cdots$$

を用い，β が偶の演算子と可換で奇の演算子と反可換であることに注意して計算することができる．$[S, H]$ のうちの $[S, \beta mc^2]=-\mathcal{O}$ により H の $\mathcal{O}$ が打ち消される．H の $\beta mc^2, \mathcal{E}, \mathcal{O}$ につきそれぞれ S の 4 次，2 次，3 次まで計算して

$$H' = \beta mc^2+\mathcal{E}'+\mathcal{O}' \tag{7.6.39}$$

を得る．ここに，新らしい偶，奇の演算子は

$$\begin{aligned}\mathcal{E}' &= \beta\left[\frac{\mathcal{O}^2}{2mc^2}-\frac{\mathcal{O}^4}{8(mc^2)^3}\right]+e\Phi-\frac{1}{8(mc^2)^2}\left[\mathcal{O}, [\mathcal{O}, e\Phi]+i\hbar\frac{\partial\mathcal{O}}{\partial t}\right]+O(\varepsilon^3),\\ \mathcal{O}' &= \frac{1}{2mc^2}\beta[\mathcal{O}, e\Phi]-\frac{\mathcal{O}^3}{3(mc^2)^2}+\frac{i\hbar}{2mc^2}\beta\frac{\partial\mathcal{O}}{\partial t}+O(\varepsilon^{5/2}).\end{aligned} \tag{7.6.40}$$

いうまでもなく奇の演算子の奇数乗は奇，偶数乗は偶であり，偶の演算子は何乗しても偶である．時間微分は ε を 1 乗だけ増すものとみなせる．この $\mathcal{O}'$ は $O(\varepsilon^{3/2})$ だから，たしかに (7.6.36) の $\mathcal{O}$ より高次になっている．

さて，こんどは (7.6.39) から $\mathcal{O}'$ を消さねばならない．再び先例にならい，

$$U' = e^{S'}, \qquad S' = \beta\mathcal{O}'/2mc^2$$

をとって (7.6.38) と同様の変換をすると，偶の演算子には $O(\varepsilon^3)$ からの変化しかないので

$$H'' = \beta mc^2+\mathcal{E}'+\mathcal{O}''. \tag{7.6.41}$$

ここに

$$\mathcal{O}'' = \frac{1}{2mc^2}\beta[\mathcal{O}', \mathcal{E}']+\frac{i\hbar}{2mc^2}\beta\frac{\partial\mathcal{O}'}{\partial t}+O(\varepsilon^3)$$

は $O(\varepsilon^{5/2})$ まで小さくなっている．もういちど変換

$$U'' = e^{S''}, \qquad S'' = \beta\mathcal{O}''/2mc^2$$

をして $\mathcal{O}''$ を消しても，やはり $\mathcal{E}'$ に見るべき変化はなく，奇の演算子は $O(\varepsilon^3)$ ま

で 0 となる．すなわち

$$H''' = \beta mc^2 + \mathcal{E}'. \qquad (7.6.42)$$

結局，最初の $\mathcal{O}$ こそ (7.6.40) の $\mathcal{E}'$ の計算で問題になるが，$\mathcal{O}', \mathcal{O}''$ はすっかり姿を消してしまった．

(7.6.40) を (7.6.36) の $\mathcal{O}$ を用いて計算し

$$H''' = \beta\left[mc^2 + \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{1}{2mc^2}\left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2\right\}^2 - \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right] + e\Phi$$
$$-\frac{e}{8}\left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2\left[\mathrm{div}\,\boldsymbol{E} + i\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathrm{curl}\,\boldsymbol{E} + \frac{2}{\hbar}\boldsymbol{\Sigma}\cdot(\boldsymbol{E}\times\hat{\boldsymbol{p}})\right] + O(\varepsilon^3) \qquad (7.6.43)$$

を得る．これを歴史的な理由から **Pauli 近似**のハミルトニアンという．虚数単位の i が目ざわりだが，最後の 2 項をいっしょにすると

$$i\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathrm{curl}\,\boldsymbol{E} + \frac{2}{\hbar}\boldsymbol{\Sigma}\cdot(\boldsymbol{E}\times\hat{\boldsymbol{p}}) = i\boldsymbol{\Sigma}\cdot(\nabla\times\boldsymbol{E} - \boldsymbol{E}\times\nabla) \qquad (7.6.44)$$

という対称和の形になり Hermite 的と知れる．特に，場が球対称な静電ポテンシャル $\Phi(r)$ のみによるとき $\mathrm{curl}\,\boldsymbol{E}=0$ で，$\boldsymbol{E} = -(d\Phi/dr)\boldsymbol{r}/r$ だから，(7.6.44) は

$$H_{\text{スピン-軌動}} = \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{d\Phi}{dr}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L} \qquad (\boldsymbol{L}\equiv\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}) \qquad (7.6.45)$$

となる．いわゆるスピン-軌道相互作用である．電場 $\boldsymbol{E}$ の中を粒子に乗って速度 $\boldsymbol{v}$ で走れば磁場 $-(\boldsymbol{v}/c)\times\boldsymbol{E}$ が見える．これが H''' の中程の $-(e\hbar/2mc)\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{B}$ なみに粒子のスピンと相互作用したら (7.6.45) の 2 倍のエネルギーになったはずである．それが半分に減ったのはスピンの Thomas 歳差運動による．(7.6.43) の $\mathrm{div}\,\boldsymbol{E}$ の項は Darwin 項とよばれ，Zitterbewegung によって解釈される．他の項の物理的意味は説明するまでもあるまい．

§7.7　空孔理論

a)　負エネルギー状態の問題

これまで，Dirac 方程式の負エネルギー解について深く考えることは避けてきた．もちろん，考えないですませられる問題ではなかったのである．なによりも，物質の安定性にそれは関わっている．たとえば水素原子．もし，Coulomb 場 V を入れた Dirac 方程式 (7.5.1) の負エネルギー解を——当然それは対応するハミ

ルトニアンの固有状態になっているが――物理世界に許される状態として認知するなら，正エネルギー状態にあって水素原子をつくっている電子が光を放って負エネルギー状態に落ちる遷移を禁止することは不可能ではないか？ 負エネルギーの連続スペクトルはエネルギー $-\infty$ までのびており，そのどこに電子は遷移してもよいから，遷移確率はおそらく無限大だ．これは，水素原子が一瞬たりとも安定に存在できないことを意味している．

よく知られているとおり，Maxwell の電磁気学と Newton の力学を柱とした古典物理学は，原子を安定に存在させることができなかった．どんな静電場も電子を安定に静止させておくことはできなかったし，かといって電子が動けば有界な領域内に留まるには加速度運動が避けられず，荷電粒子の加速度運動はとりもなおさず電磁放射によるエネルギー損失を意味していた．Bohr 半径の軌道をまわろうとした電子は，意にそわぬ光をだして 1.6×10^{-11} (s) ほどで核に墜落しなければならなかったのである．

それを，量子力学が救ったのだった．いま，量子力学と相対性理論の融合がはかられたとき，物質の安定性は再び危機にさらされることになった．

では，負エネルギー解は物理的実在ではないと宣言することにしてはどうか？ 実際，負エネルギー解は，(*7.4.23*)の前に注意したように，粒子の運動量が速度と逆向きになるなど奇妙な性質をもっている．エネルギーが $-\sqrt{c^2p^2+m^2c^4}$ だから，速度の方向に力を加えて仕事をしてやると粒子はエネルギーを増すために運動量の大きさを減らすほかない．それにもかかわらず，これが力の方向への運動量の増加であるためには，もともと運動量は速度と逆向きであるほかない．引けば退こうとするロバ電子．そんな粒子が見出されたためしはないから，これは物理的実在でないという公理を相対論的量子力学に加えてはどうか？

それは，しかし，量子力学の変換理論に牴触する．水素原子の正エネルギー固有関数は，自由粒子の解で展開したとき負エネルギー成分を含んでいたではないか．

空間の領域 $x<0$ から $x=0$ に向かって完全に正エネルギー解として近づいてきた波が，領域 $x>0$ に入って負の運動エネルギーをもつ負エネルギー解の振舞いに変わるという場合もある(O. Klein のパラドックス(1929)，図 7.11)．もちろん，境界で波の一部は反射されるけれども，粒子のエネルギー E に対して $x<0$, $x>0$ の領域での $mc^2/|E-V|$ を $\sin\gamma$, $\sin\gamma'$ とおくとき $(0\leqq\gamma, \gamma'\leqq\pi/2)$,

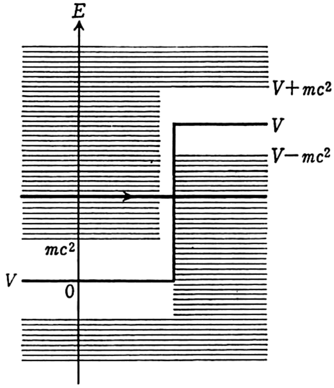


図 7.11　Klein のパラドックス

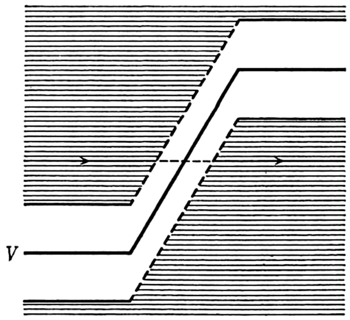


図 7.12

流束の反射率は

$$R=[1-\cos(\gamma+\gamma')]/[1+\cos(\gamma+\gamma')]$$

となり，E と V を両方の領域で $|E-V|\to\infty$ となるように増してゆけば完全透過 $R=0$ に近づく！　透過率 $1-R$ は，ポテンシャルの変化をなだらかにすれば(図 7.12)，禁制帯を通り抜けるトンネル効果の必要から急激に減るが，電子がポテンシャルの変化にぶつかってロバ電子に変わる確率が 0 になるわけではないから，ロバを量子力学から締め出すことはできない．

また，負エネルギー状態を締めだすと，電子による光の散乱断面積 σ がほとんど 0 になってしまう (I. Waller のパラドックス，1929)．光との相互作用はハミルトニアン(7.6.22)の $-e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A}$ の項で与えられるが，とくに静止した自由電子($\boldsymbol{p}=0$)が低エネルギー光子(運動量 $\hbar\boldsymbol{k}\to 0$)を散乱するという Thomson 散乱の極限では，正エネルギー状態を結ぶ $\boldsymbol{\alpha}$ の行列要素(7.4.29)が $\boldsymbol{p}=0$，$\boldsymbol{p}'=\boldsymbol{p}+\hbar\boldsymbol{k}\to 0$ で $\to 0$ になってしまうので，散乱断面積も $\sigma\to 0$ となり，古典論からも非相対論的量子力学からも導かれ実験にもあっていた Thomson の公式

$$\sigma \underset{k\to 0}{\sim} \frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2 \tag{7.7.1}$$

に矛盾してしまう．この矛盾は，しかし，負エネルギー状態を認知すれば解消するのである．

このことを見るために，電子による光の散乱過程の遷移確率を摂動論の公式

(6.2.33)によって計算しよう．

Dirac 理論の摂動 $-e\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{A}$ では，光の散乱は1次ではおこらず，2次ではじめて図7.13の過程によっておこる．ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}=\mathscr{A}\boldsymbol{\varepsilon}e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}+\mathrm{c.c.}$ で表される光が散乱されて，偏りと波数ベクトルがそれぞれ $\boldsymbol{\varepsilon}', \boldsymbol{k}'$ に変わるものとしよう．図7.13(a)が表すのは，(7.4.27)の状態 $(\boldsymbol{p}, s)$ の自由電子が入射光子 $(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{\varepsilon})$ を吸って状態 $(\boldsymbol{p}'', s'')$ にうつり，つぎに光子 $(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{\varepsilon}')$ を放出して状態 $(\boldsymbol{p}', s')$ にうつるという過程である．図7.13(b)では光の吸収と放出の順が逆になっている．公式(6.2.33)によれば，こうした過程による光の散乱の遷移確率は

$$w=\frac{2\pi}{\hbar}|M|^2\rho_{\omega',d\Omega}, \qquad \rho_{\omega',d\Omega}\equiv\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{\omega^2}{\hbar c^3}d\Omega \tag{7.7.2}$$

によって与えられる．ここに，

$$M\equiv\sum_{\boldsymbol{p}'',s''}e^2|\mathscr{A}|^2\left\{\frac{\langle\boldsymbol{p}', s'|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'|\boldsymbol{p}'', s''\rangle\langle\boldsymbol{p}'', s''|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}|\boldsymbol{p}, s\rangle}{E''-E-\hbar\omega}\right.$$
$$\left.+\frac{\langle\boldsymbol{p}', s'|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}|\boldsymbol{p}'', s''\rangle\langle\boldsymbol{p}'', s''|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'|\boldsymbol{p}, s\rangle}{E''+\hbar\omega'-E}\right\}. \tag{7.7.3}$$

ただし，規格化体積 V を導入し

$$\langle\boldsymbol{p}'', s''|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'|\boldsymbol{p}, s\rangle$$
$$\equiv\int_V\left[\sqrt{\frac{1}{V}}u^{(s'')}(\boldsymbol{p}'')e^{i\boldsymbol{p}''\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\right]^\dagger\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'e^{\pm i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\left[\sqrt{\frac{1}{V}}u^{(s)}(\boldsymbol{p})e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\right]d^3\boldsymbol{r}$$

とした(複号は上が吸収過程，下が放出過程のとき)．

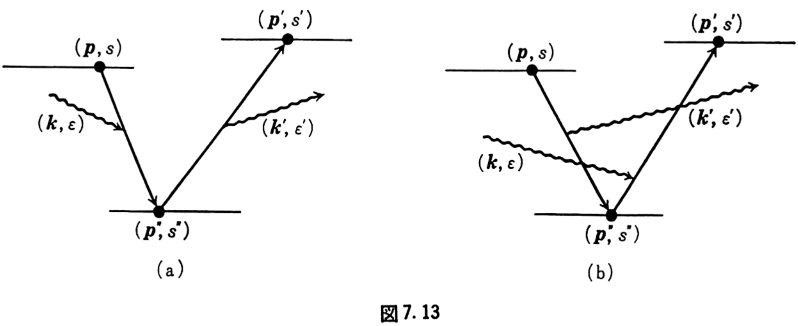


図7.13

ここでは，$\boldsymbol{p}=0$，$\boldsymbol{k}\to0$ という Thomson 散乱の極限を考える．

このとき，もし電子の中間状態 $(\boldsymbol{p}'', s'')$ を正エネルギーのものに限るならば，

(7. 4. 29) により $M=O(kk'/\omega)\to 0$ となる．まえに述べたとおりである．

しかし，$(\boldsymbol{p}'', s'')$ に負エネルギー状態 (7. 4. 28) をとれば，(7. 6. 19) より

$$\langle \boldsymbol{p}'', s''|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'|\boldsymbol{p}, s\rangle \underset{\substack{p=0\\ k\to 0}}{\sim} \langle \chi_{s_3''}, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'\chi_{s_3}\rangle \delta_{\boldsymbol{p}'',0}. \tag{7.7.4}$$

これを (7. 7. 3) に入れると，いま $-E''\sim E=mc^2\gg\hbar\omega, \hbar\omega'$ なので

$$M=-|\mathscr{A}|^2\frac{e^2}{mc^2}\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'\delta_{s_3,s_3'} \tag{7.7.5}$$

という 0 でない遷移振幅が得られる！　ただし，

$$\sum_{s_3''}\langle \chi_{s_3'}, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}\chi_{s_3''}\rangle\langle \chi_{s_3''}, \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'\chi_{s_3}\rangle=\langle \chi_{s_3'}, (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\varepsilon})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}')\chi_{s_3}\rangle$$

などを (7. 4. 30) を用いて計算し，$\boldsymbol{p}''$ に関する和は (7. 7. 4) の $\delta_{\boldsymbol{p}'',0}$ で処理した．

いま，規格化体積 V のなかに入射光子が 1 個としよう．エネルギー密度の比較 $\omega^2|\mathscr{A}|^2/2\pi c^2=\hbar\omega/V$ から $|\mathscr{A}|^2$ を求め，(7. 7. 5) を (7. 7. 2) に代入して

$$w=\frac{2\pi}{\hbar}\cdot\left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}\right)^2\left(\frac{e^2}{mc^2}\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'\right)^2\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{\omega^2}{\hbar c^3}d\Omega.$$

光の散乱断面積 $d\sigma$ は，これに光子の流束 c/V をかけると遷移確率 w になるべきだから

$$d\sigma_{\varepsilon,\varepsilon'}=\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}')^2d\Omega. \tag{7.7.6}$$

これから，入射光，散乱光の偏りの相関関係が知れる．入射光が偏光していないなら，上の断面積を $\boldsymbol{\varepsilon}$ の方向に関して平均する．$(\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}')^2$ の平均は入射波面への $\boldsymbol{\varepsilon}'$ の射影の 2 乗の半分になる (図 7. 14)．さらに散乱光の偏光を区別しない観測をすることにして，$\boldsymbol{\varepsilon}'$ の独立な 2 方向にわたる和をとれば，散乱角を θ として

$$d\sigma=\sum_{\varepsilon'}\frac{1}{2}\sum_{\varepsilon}d\sigma_{\varepsilon,\varepsilon'}=\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2\frac{1+\cos^2\theta}{2}d\Omega. \tag{7.7.7}$$

これを全立体角にわたり積分すると，たしかに Thomson の公式 (7. 7. 1) が得られる．光の自由電子による散乱断面積は，上のように $\boldsymbol{k}\to 0$ に限らなくても，もちろん計算できて，いわゆる Klein-Nishina の公式 (1929) が得られるのである．こうして，負エネルギーの状態もいちがいに無視してしまうわけにはいかないことがわかった．

しかし，他方，負エネルギー状態を認知したら物質が安定に存在できないという事態をまねくこと，さきに述べたとおりである．Dirac 理論のディレンマ！

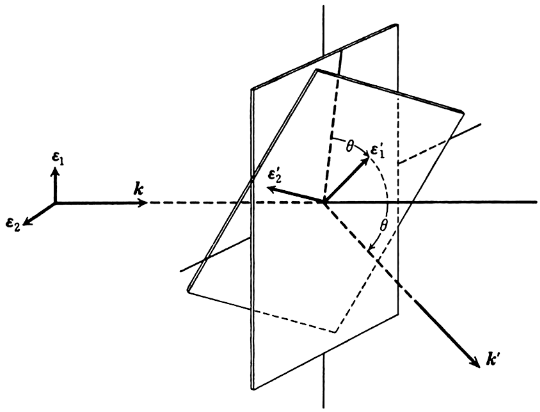


図 7.14 $(\boldsymbol{\varepsilon}_j\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_i')^2$ の $\boldsymbol{\varepsilon}_j$ の方向に関する平均は

$$[(\boldsymbol{\varepsilon}_1\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_i')^2+(\boldsymbol{\varepsilon}_2\cdot\boldsymbol{\varepsilon}_i')^2]/2$$

に等しい．これを計算するには，$\boldsymbol{k}$ に垂直な平面と $\boldsymbol{k}'$ に垂直な平面の交線の方向に $\boldsymbol{\varepsilon}_2'$ をとっておくとよい．

b) 空孔仮説

Dirac は，負エネルギー状態には平常は完全に電子が充満しているという仮説をだした(1930)．負エネルギー電子の海！ 電子は Pauli の禁制に従うので，負エネルギー状態に空席がなければ，そこに遷移することはできない．こうして物質の安定性が保証されているというのである．

この仮説によれば，いわゆる真空にも無数の電子が存在することになるが，なぜこれらの電子は観測にかからないのだろうか？

真空中に荷電粒子(正エネルギー)を走らせたとしよう．この粒子は充満した負エネルギーの電子に散乱されないのか．もし散乱されたとすると，負エネルギーの電子は別の負エネルギー状態にうつるか，正エネルギーの状態にうつるかであるが，前者は Pauli の原理が許さない．後者が起こったとして，正エネルギー荷電粒子の4元運動量を p，負エネルギー電子のそれを q とし，それぞれが散乱により p', q' に変わったとすれば，エネルギー・運動量の保存則から

$$p+q = p'+q'. \tag{7.7.8}$$

いま p の空間部分を $\boldsymbol{p}=0$ としても一般性を失わない．こうしておいて(7.7.8)を2乗すると

$$p_0q_0 = p_0'q_0' - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q}$$

が得られる．ところが，仮定により左辺では $p_0q_0<0$ であるのに，$p_0'q_0'>0$ であり $p_0'q_0'>|\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q}|$ だから右辺は負になり得ない．よって，このような散乱はおこり得ないのである．走らせた荷電粒子が同時に複数個の負エネルギー電子を正エネルギーの状態に散乱するとしても，やはり矛盾がでる．だから，真空中を走る荷電粒子に対して旧来どおり慣性の法則が成り立つ．

真空中に光を走らせたとしても同様のことがいえる．真空中に充満しているという負エネルギー電子は，荷電粒子によっても光によっても観測されないのだから，無いのと同じである．

しかし，別に運動量ないしエネルギーを吸収してくれる第三者が介在すれば，当然その第三者によって荷電粒子も光も散乱されるが，そこに負エネルギー電子の海の影響も現れることになる．荷電粒子を走らせた場合，もはや(7.7.8)が成り立たないので，負エネルギーの電子が正エネルギーに遷移することもおこり得る．そうすると負エネルギー電子の海に空席が生ずる(図7.15)．

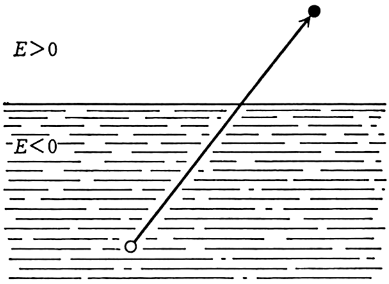


図7.15　電子対創成

この空席を**空孔**とよぶが，これは負のエネルギーと負の電荷が欠けたところだから，正エネルギーで正電荷の粒子のように見えるだろう．荷電粒子が第三者なる物質によって散乱されるときに，正エネルギーで負電荷をもつ電子と正エネルギーで正電荷の粒子が創成されるということである．もろろん，この**対創成**をおこすためには，荷電粒子は十分に高いエネルギーで物質に衝突する必要がある．光子もエネルギーが十分に高ければ物質に衝突して対創成をおこすだろう．これはDiracの仮説から導かれる検証可能な予言である．

空孔の考えによって，負エネルギー電子の物理的に奇妙な振舞が理論から除か

れ，つじつまのあった，物理の常識にも沿う描像が得られる点も注目される．負エネルギー電子は，電場をかけると力と逆向きに加速されるのだったが，これは電場の向きへの加速だから，空孔の正電荷にとってはまさにあるべきことである．また，負エネルギー電子は速度と逆向きの運動量 $\boldsymbol{p}$ をもつのだったが，その欠如としての $-\boldsymbol{p}$ は速度と同じ向きになる．

Dirac は，負エネルギーの電子を当時知られていた唯一の正荷電の粒子である陽子と解釈しようとした H. Weyl の考え(1929)を想起して，負エネルギー電子の海に現れる空孔をこそ陽子とみなそうと提案した．陽子は電子と質量がひどくちがうけれど，まわりに充満している電子との相互作用が孔の質量を変えるのだろう．そう Dirac は期待したのだった．

陽子が電子の海の空孔だとしたら，水素原子の電子は一瞬にして核である空孔に落ちこみ，原子は光を発して消滅してしまう．そう J. R. Oppenheimer が指摘した(1930)．Weyl は空孔が電子と正確に同じ質量をもつことを示した(1931)．

Dirac は，空孔を陽子とする説を撤回して，これを未知の粒子とし**反電子**と名づけた．これに対して，W. Pauli は “Dirac の説では γ 線が電子と反電子の対に転化し得ることになるから，この説は真面目な考察にあたいしない” と『波動力学の一般原理』に書いたが，この本の出版(1933)よりさきに反電子の軌跡が C. D. Anderson の霧箱写真にうつっていたのだった．この正電荷の電子，すなわち**陽電子**の存在が一般の承認を得たのは，P. M. S. Blackett と G. P. S. Occhialini の精緻な観測(1933)によるところが大きい．こうして，Dirac の仮説は未知の粒子の存在を正しく予言したことになる．

では，Dirac の空孔仮説をみとめるとしたら，これまで負エネルギー電子の海など考えずに Dirac 方程式から導きだしていた結論は棄てねばならないのか？

まず，前項に述べた Thomson 散乱の理論を考え直してみよう．空孔仮説の立場から考えられる過程は図 7.16 の 2 つである．図 7.16(b) では，入射光$(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{\varepsilon})$が負エネルギーの海の電子$(\boldsymbol{p}'', s'')$を正エネルギー状態$(\boldsymbol{p}', s')$にたたきあげ，そこに生じた空孔に入射電子$(\boldsymbol{p}, s)$が落ちて光$(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{\varepsilon}')$をだす．これが散乱光である．図 7.16(a) では光の吸収と放出の順が逆になっている．こうした過程に摂動論の公式(*6. 2. 33*)を適用して得られる遷移振幅は

$$M_{空孔理論} = \sum_{p'',s''} e^2|\mathscr{A}|^2 \left\{ \frac{\langle \boldsymbol{p}'', s''|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}|\boldsymbol{p}, s\rangle\langle \boldsymbol{p}', s'|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'|\boldsymbol{p}'', s''\rangle}{|E''|+E'+\hbar\omega'} \right.$$
$$\left. + \frac{\langle \boldsymbol{p}'', s''|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}'|\boldsymbol{p}, s\rangle\langle \boldsymbol{p}', s'|\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{\varepsilon}|\boldsymbol{p}'', s''\rangle}{|E''|+E'-\hbar\omega} \right\} \qquad (7.7.9)$$

であって，一見(7.7.3)とちがうけれども，エネルギーの保存

$$E+\hbar\omega = E'+\hbar\omega'$$

が成り立つので

$$M_{空孔理論} = -M.$$

符号のちがいは断面積を変えないから，空孔理論によっても，Thomson の公式は少なくとも摂動の 2 次までは変わりなく導かれることがわかる．

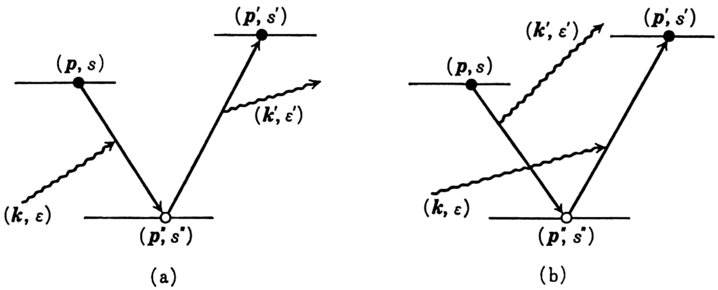


図 7.16

水素原子はどうか．その負エネルギー準位は完全に電子で充満していると考えねばならない．それらの電子の波動関数は核の Coulomb 場のせいで自由電子の波動関数に比べて歪んでいるから，負エネルギーの電子全体としても分布は一様でないことになろう．歪んだ電荷分布は電場をつくり，本来の核の Coulomb 場を多少とも変えるにちがいない．真空に充満した負エネルギー電子が電媒質のように分極して核の電荷を遮蔽するのである．さらに言葉をかえて，電子・陽電子が対創成され，陽電子は核に反撥され電子は引き寄せられる結果として**真空が分極する**のだといってもよい．そうだとすれば，水素原子のエネルギー準位も波動関数も変わり，それらを解き直そうとすれば問題は電子 1 個のことではすまない．仮に核を不動としても，無限個の電子を相手どる多体問題を解くことになる．

光の散乱の問題でも，摂動の高次まで進めば同様の事態に直面することになろ

う．中間状態に存在し得る電子・陽電子の対の数に限りはないからである．

Dirac 理論は量子力学の転回点になった．創られたり消滅したりするのが相対論的量子力学における粒子の本質と知れたのだ．ときあたかも，生成・消滅して総数の定まらない多粒子系を記述する形式として量子化した場の理論が展開されつつあった．最も簡単な系と思われる水素原子にしてすでに，無限の自由度をもつ電子場と無限の自由度をもつ輻射場の相互作用の問題として扱うことになる．光の散乱も同じである．その説明は，本巻第10章と『素粒子論』の巻にゆずることにしよう．結論だけ先どりしていえば，電子に対するこれまでの1体問題的な取扱いの結果は，ポテンシャルが弱く電子の運動量も大きくない場合，Pauli 近似(*7.6.43*)の精度までは正しい．

第8章　力学系の対称性

力学系のハミルトニアンが空間座標の反転に対して不変である場合，その系の状態としてパリティが不変な性質を与えること，また同種の多粒子からなる系については粒子の番号付けの置換に対する状態の性質が不変であることなどについてはすでに学んだ．ここで不変というのは時間とともに変わらないことも意味する．この性質を活用することによって，面倒な計算，たとえば遷移行列を実際に計算しなくとも，ある遷移過程は禁止されるという選択規則などが視察によって見い出されることも知った．

さらに量子力学の基本的な観測量である運動量や角運動量が座標系のそれぞれ平行移動や回転の無限小演算子になっていること，そして力学系のハミルトニアンが空間座標の平行移動や回転に対して不変である場合，この系の運動量や角運動量の固有値がよい量子数になっていることも学んだ．

われわれはまず座標系を設定して，それにもとづく座標を用いて力学系を記述する．したがって力学系に関する物理法則は座標系の変換にさいして共変，すなわち同じ形に書かれなければならない．本章では座標系の変換として，非相対論的な範囲に限定して，広い意味での Galilei 変換を考える．広い意味といったのは，3次元 Euclid 空間における平行移動，回転，等速度相対運動を含めた，Newton 力学の基本的座標変換を包括的に取り扱うためである．これは単に形式的整備のためではなく，物理的空間の本質に深く根ざしたものである．その意味は§8.4および§8.7で説明される．

古典物理学においては上記の変換はそれぞれ‘操作’であって，観測されるべき‘量’ではなかった．しかし量子力学では，それらの‘操作’を量子力学的に表現することによって，観測の対象としての物理量に転化させることができる．

これらの変換はいずれも数学でいう群(group)をつくっているから，まず群に

関する基本的知識をわれわれに必要な範囲で説明し(§8.1)，ついで量子力学における基本的物理量としての運動量および角運動量を理解するため，Lie群とよばれる連続群，そしてその局所的性質を見るためにそのLie代数の構造を調べる(§8.2).

本章で最も力を入れたのは，Lie代数を量子力学的に表現することである．本章以前では量子力学的表現として直ちにHilbert空間におけるベクトル表現がとられてきたが，ここでは本来の量子力学的表現である射線表現から出発する(§8.3)．そうして調べた結果，物理的空間の等方性から運動量と角運動量がともにベクトル表現をとって差し支えないことが示される(§8.4)．ついで射線表現とベクトル表現が同値にならない重要な例としてGalilei変換が論ぜられ，量子力学の基本的交換関係が導かれる(§8.7).

量子力学を使って具体的問題を解く場合，あるいは多粒子系の対称性を調べる場合に必要になる，角運動量の合成，および粒子座標の置換に関する対称性の分類は，できるだけ平行した形で，すなわち表現の既約分解として説明される(§8.6, §8.10).

なお読者の理解に役立つようにとの配慮から，軌道角運動量とスピンの関係について(§8.5)，また直接時空の対称性と結びつかない，力学系に内在する対称性について(§8.9)，それぞれ多少のページ数をあてた.

本来，力学系の対称性は審美的なものというより，遷移過程の選択則(selection rule)を見い出す強力な手段として重要な意味をもつものである．しかしそれらについてはそれぞれの章で個別に論ぜられるから本章では割愛する.

最後に，本章では群や代数に関する数学の術語がいくつか出てくるが，それらはそのつど説明し，群論やLie代数についての知識は一切前提にしていない．簡単な行列演算と高校程度の代数の知識だけで十分理解できるよう配慮したつもりである．ただしHilbert空間についての2,3の重要な性質は本講座第4巻『量子力学Ⅱ』第Ⅵ部第16章の説明に先立って証明抜きで用いた．これは一つには第Ⅵ部以下の一見極めて数学的な説明が量子力学の基礎的構造を理解するためにいかに重要であるかを，読者に知っておいていただくためでもある.

§8.1 群の定義とその構造

われわれが物理学で用いる多くの量の集まりはそれらの間の演算に関して**群**と呼ばれる性質をもっている．たとえば，すべての実数の集合，すべての複素数の集合は加法に関して，また乗法に関して群になっている．また n 個の実数あるいは複素数を成分とするすべてのベクトルの集合は加法に関して群になっている．さらに複素数を成分とする n 次の正方行列のうち行列式が零でないもののすべての集合は行列の乗法に関して群になっている．最後の例の特殊なものとして，実数を成分とする 3 次の正方行列のうち行列式が 1 に等しくかつ逆行列(もとの行列との積が 1 になる行列)が転置行列(行と列を入れかえた行列)に等しいもののすべての集合は 3 次元 Euclid 空間の回転操作の全体を表すから，上に述べた‘量’に操作を含めてもよい．その場合‘演算’は 2 つの操作を続けて行うことと理解すればよい．

一般的な性質を述べるには，抽象的な言葉や記号が便利である．そこで，群の定義を抽象的に述べると，次のようになる：“群 G とは s, t, u などの文字で表される**元**(element)の集合があり，任意の 2 つの元 s, t の間に演算 $\circ$ が定義されていて

(G1) $s, t \in G$ ならば $t \circ s \in G$ なる $t \circ s$ が唯一つ存在する．

(G2) $s, t, u \in G$ ならば $(s \circ t) \circ u = s \circ (t \circ u)$ が成り立つ．

(G3) G の任意の元 s に対し $s \circ e = e \circ s = e$ なる元 e が G に存在する．e を単位元という．

(G4) G の任意の元 s に対し $s \circ s^{-1} = s^{-1} \circ s = e$ を満たす s^{-1} が G に存在する．s^{-1} を s の逆元という．

の 4 つの性質が満たされているものである”．

冒頭にあげたいくつかの例について群の元および演算は明らかであるが，群論が強力な道具として使えるのは個々の演算を具体的に指定しなくとも，上の抽象的な性質――これを群の公理系と呼ぶことがある――からかなりのことがいえる点にある．本章の後半および第 9 章で使う部分群，剰余群などがそうである．これからは簡単のため演算記号 $\circ$ を略して $s \circ t = st$ と書くことにする．

群 G の空でない部分集合 H が，(i) $H \ni s, t \Rightarrow st \in H$, (ii) $H \ni s \Rightarrow s^{-1} \in H$ を満たすとき H を G の**部分群**(subgroup)という．ここに $\Rightarrow$ は‘ならば’の記号であ

る．部分群の中で次の条件を満たすものは物理学ではとくに重要である．すなわち H が G の部分群であり，かつ G の任意の元 s に対し $sHs^{-1}=H$ が成り立つときである．このとき H を G の**正規部分群**(normal subgroup)あるいは**不変部分群**(invariant subgroup)という．3次元 Euclid 空間の回転群のなかから，正多面体の中心を原点として，原点を中心とする回転でその正多面体を自分自身に重ね合わせるものをとりだすと，たとえば正4面体の場合は12個の元からなる正規部分群が得られる．どんな群でも少なくとも2個の正規部分群をもつ．すなわちもとの群 G そのものがそうであり，また単位元 e のみよりなる群もたしかに上の条件を満たすからである．これらは余りにもトリビアルな例であるが，一般に群 G が正規部分群 H をもつ場合，G を H で'割る'ことができる．その意味を知るために，まず群 G の部分集合 S と T からつくる集合を次のように定義する：$ST=\{st : s\in S,\ t\in T\}$．もし S が部分群ならば $SS=S$ なることは明らかである．とくに S が唯一つの元 s だけの集合のとき $\{s\}T$ の代りに sT と書くことにする．さて H が G の部分群のとき G の元 s, t が $s^{-1}t\in H$ なるとき $s\sim t$ と書くことにすると $\sim$ は次のような**同値関係**(equivalence relation)の3法則を満たすことが容易に確かめられる．(E1) $s\sim s$，(E2) $s\sim t\Rightarrow t\sim s$，(E3) $s\sim t, t\sim u\Rightarrow s\sim u$．それゆえ集合 sH のすべての元は s と同値であるということができる．同値なものの集合を**同値類**(equivalence class)という．もし H が G の正規部分群ならば，H でつくった同値類の集合 $\{sH : s\in G\}$ は $sHtH=stHt^{-1}tH=stHH=stH$ であるからこのような演算に関して群になっていることがわかる．これを G/H と書き，G の H を法とする**剰余群**(residue class group)あるいは**商群**(quotient group)また時には**因子群**(factor group)ともいう．

抽象的な群の性質は一応この位にして，次に具体的な群の性質を調べることにしよう．まず元の数が有限個あるいは可付番個の群を考える．これらはそれぞれ有限群(finite group)，無限離散群(infinite discrete group)とよばれる．これらの場合，群 G の元は番号を添字にした記号 g_i で表される．そして演算は

$$g_i g_j = g_{\varphi(i,j)} \in G \tag{8.1.1}$$

と書くことができる．ここに $\varphi(i,j)$ は自然数 i と j によって，その順序も含めて一意的にきまる自然数である．(8.1.1)を表にしたものを群 G の**乗積表**(multiplication table)あるいは**群表**(group table)と呼んでいる．

群 G の元が連続無限個ある場合，G を**連続群**(continuous group)という．連続群の各元を n 個の実数の組で標識することがすぐ頭に浮かぶであろうが，一般にはこれは必ずしも可能ではない．このことに関連してはすぐ後でやや詳しく説明することにしよう．ここでは前に述べた有限群あるいは無限離散群と対比させるため，各元が n 個の独立な実数パラメーターで表される連続群 G を考える．すなわち $s, t, u \in G$ がそれぞれ

表 8.1 群の乗積表

	g_1	$\cdots$	g_j	$\cdots$
g_1			$\vdots$	
$\vdots$			$\vdots$	
g_i	$\cdots\cdots$		$g_{\varphi(i,j)}$	
$\vdots$				

群 G の性質はすべてこの表の中に含まれている．

$$s = g(\alpha_1, \cdots, \alpha_n)$$
$$t = g(\beta_1, \cdots, \beta_n)$$
$$u = g(\gamma_1, \cdots, \gamma_n)$$
$$\alpha_i, \beta_i, \gamma_i \in \mathsf{D} \subset \mathsf{R} \qquad (i=1, \cdots, n)$$

と表されるとする．もし $st=u$ ならば，(8.1.1)の $\varphi(i, j)$ に対応して

$$\gamma_i = f_i(\alpha_1, \cdots, \alpha_n;\ \beta_1, \cdots, \beta_n) \qquad (i=1, \cdots, n) \qquad (8.1.2)$$

がえられる．この場合は表にすることはできないが，群 G のすべての性質が

$$\{f_i(\alpha_1, \cdots, \alpha_n;\ \beta_1, \cdots, \beta_n) : \alpha_i, \beta_i \in \mathsf{D}\ (i=1, \cdots, n)\}$$

の中に含まれている点では前にのべた乗積表と同様である．

有限群や無限離散群の場合は乗積表が与えられればそれらの群の具体的構造を知ることができるが，連続群の場合は上にあげた特殊な例についても関数 $f_i(i=1, \cdots, n)$ の具体的な形をいきなり与えられただけでは，その構造を把握することは困難である．しかし連続群の中で Lie 群とよばれるものについてはよく調べられている．Lie 群の構造を次節で説明する前に，上にあげた連続群の例について，単位元 $e \in G$ の n 個のパラメーターの値がすべて零になるようにパラメーターを選んだ場合にえられる関係式をあげておこう．

$$f_i(\alpha_1, \cdots, \alpha_n;\ 0, \cdots, 0) = \alpha_i \qquad (8.1.3)$$
$$f_i(0, \cdots, 0;\ \beta_1, \cdots, \beta_n) = \beta_i \qquad (8.1.4)$$
$$(i=1, \cdots, n)$$

もし $f_i(\alpha_1, \cdots, \alpha_n;\ \beta_1, \cdots, \beta_n)$ が $\alpha_1, \cdots, \beta_n$ について連続かつ微分可能ならば，(8.1.3)および(8.1.4)から

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}\right)_{\substack{\alpha_k=0\\ \beta_k=0}} = \delta_{ij}, \qquad \left(\frac{\partial f_i}{\partial \beta_j}\right)_{\substack{\alpha_k=0\\ \beta_k=0}} = \delta_{ij} \qquad (8.1.5)$$

がえられる．ここに δ_{ij} は Kronecker の記号である．また原点($\alpha_i=0$, $\beta_i=0$, $i=1, \cdots, n$)の近傍では(8. 1. 3)および(8. 1. 4)により

$$f_i(\alpha_1, \cdots, \alpha_n;\ \beta_1, \cdots, \beta_n) = \alpha_i + \beta_i \qquad (i=1, \cdots, n) \qquad (8.\,1.\,6)$$

となる．これはもとの群 G が単位元すなわち原点の近傍では n 個の1パラメーター部分群 $\{g(0, \cdots, 0, \alpha_i, 0, \cdots, 0) : \alpha_i \in \mathbb{D}\}$ をもつことを示す．

§8. 2　Lie 群と Lie 代数

Lie 群 G とは連続群のなかで，任意の元の近傍が前節の終りにあげた例のように，n 個のパラメーターで表されるもののことである(本章ではパラメーターは実数とするが，複素数をパラメーターとする Lie 群もある．第7章で Lorentz 群を調べるときに用いた $SL(2, \mathbb{C})$ がそれに該当する．それゆえ厳密には実 Lie 群，複素 Lie 群といわなければならないが，本章で扱うのはすべて実 Lie 群であるから，とくに必要がある場合を除き単に Lie 群ということにする．実 Lie 群と複素 Lie 群との関係は§8. 5 でのべる)．すなわち G の任意の元 s をとった場合，G のすべての元に s^{-1} を掛けることによって s 自身を単位元に移して，その点を原点として前節のようにパラメーターを入れることができるものをいう．曲面との類比でいうとその曲面上の任意の点の近傍が平面で近似される素直な曲面に対応する．したがって Lie 群の局所的な性質は比較的調べやすい．本節では Lie 群の局所的な性質に焦点をあてて論ずる．量子力学に有用なのは正にその性質だからである．

ところで量子力学においては，すでに第4章で学んだように力学系の状態は Hilbert 空間のベクトルで表される(より厳密には純粋状態は射線で表される．これについては次節で説明する)．そして観測量は Hilbert 空間に作用する自己共役な線形演算子で表されなければならないことも知っている．それゆえわれわれは Lie 群 G についてもまずそれぞれの元を Hilbert 空間のベクトル ψ に作用するユニタリー演算子で表現したものについて考えることにしよう．すなわち

$$G \ni s \longmapsto \hat{U}(s)$$
$$G \ni s, t \implies \hat{U}(st) = \hat{U}(s)\,\hat{U}(t)$$
$$\|\hat{U}\psi\| = \|\psi\| = 1$$

さて Lie 群 G は任意の元の近傍で n 個の1パラメーター部分群をもつことは

前節の終りの議論から明らかであるから，1パラメーターτをもつユニタリー演算子に関する基本的な次の定理を借用しよう．

[Stoneの定理] Hilbert空間のユニタリー変換$\hat{U}(\tau)$が

$$\hat{U}(\tau)\hat{U}(\tau')=\hat{U}(\tau+\tau'), \qquad \hat{U}(0)=I$$

$$\lim_{\tau\to\tau_0}\|(\hat{U}(\tau)-\hat{U}(\tau_0))\psi\|=0$$

を満たすならば

$$\lim_{\tau\to 0}\tau^{-1}\|(\hat{U}(\tau)-I)\psi\|=\hat{A}\psi \tag{8.2.1}$$

なる自己共役な演算子$\hat{A}$が定義できて

$$\hat{U}(\tau)=\exp[i\tau\hat{A}]\equiv\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\tau A)^n}{n!} \tag{8.2.2}$$

と表すことができる([Stone](1932年))．

この定理はさらに一般化的に複素Banach空間についても成り立つ重要なものである([吉田-Hilleの定理](1948年))[†]．この定理のおかげでLie群Gの局所的な性質を与えるn個の1パラメーター部分群は，それぞれ

$$g(0,\cdots,\alpha_j,\cdots,0)\longmapsto\hat{U}(\alpha_j)=\exp[i\alpha_j\hat{A}_j] \qquad (j=1,\cdots,n) \tag{8.2.3}$$

で表現されることがわかる．異なる部分群の間の関係は(8.1.2)から導くことができる．すなわち

$$\left.\begin{aligned}&g(0,\cdots,\alpha_j,\cdots,0)g(0,\cdots,\beta_k,\cdots,0)=g(f_1,\cdots,f_n)\\&f_m=f_m(0,\cdots,\alpha_j,\cdots,0;\ 0,\cdots,\beta_k,\cdots,0) \qquad (m=1,\cdots,n)\end{aligned}\right\} \tag{8.2.4}$$

に対応して

$$\exp[i\alpha_j\hat{A}_j]\exp[i\beta_k\hat{A}_k]=\hat{U}(f_1,\cdots,f_n) \tag{8.2.5}$$

であるから，上式の両辺をα_jおよびβ_kについて微分して$\alpha_j=0$, $\beta_k=0$とおくと

$$-\hat{A}_j\hat{A}_k=\frac{\partial^2\hat{U}}{\partial f_k\partial f_j}+\sum_{m=1}^{n}\frac{\partial\hat{U}}{\partial f_m}\frac{\partial^2 f_m}{\partial\beta_k\partial\alpha_j} \tag{8.2.6}$$

がえられる．この計算には(8.1.5)が用いられている．つぎに(8.2.5)の左辺でjとkを入れかえて同様な計算を行うと

† その証明については邦書では[吉田，河田，岩村]のpp. 208–222を，Stoneの定理の簡明な証明については[吉田]p. 76または[van der Waerden]p. 84を参照されたい．なお[吉田-Hilleの定理]はBrown運動の理論においても重要な役割を果たす．(本講座第2巻『古典物理学II』§16.2参照)

$$-\hat{A}_k\hat{A}_j = \frac{\partial^2 \hat{U}}{\partial f_j \partial f_k} + \sum_{m=1}^{n} \frac{\partial \hat{U}}{\partial f_m} \frac{\partial^2 f_m}{\partial \beta_j \partial \alpha_k} \tag{8.2.7}$$

がえられる．そこで(8.2.6)から(8.2.7)を辺々相引き，**Lie の積**(Lie product) と呼ばれる記号 $[\hat{A}_j, \hat{A}_k] \equiv \hat{A}_j\hat{A}_k - \hat{A}_k\hat{A}_j$ を用いると

$$-[\hat{A}_j, \hat{A}_k] = \sum_{m=1}^{n} \left(\frac{\partial^2 f_m}{\partial \beta_k \partial \alpha_j} - \frac{\partial^2 f_m}{\partial \beta_j \partial \alpha_k} \right) \frac{\partial \hat{U}}{\partial f_m} \tag{8.2.8}$$

がえられる．いま問題にしている点の近傍では

$$\frac{\partial \hat{U}}{\partial f_m} = i\hat{A}_m \tag{8.2.9}$$

であるから

$$\left(\frac{\partial^2 f_m}{\partial \beta_k \partial \alpha_j} - \frac{\partial^2 f_m}{\partial \beta_j \partial \alpha_k} \right)_{\substack{\alpha_l=0 \\ \beta_l=0}} \equiv C_{jk}{}^m \tag{8.2.10}$$

とおくと，(8.2.8)は

$$i[\hat{A}_j, \hat{A}_k] = \sum_{m=1}^{n} C_{jk}{}^m \hat{A}_m \tag{8.2.11}$$

という簡明な式になる．

Lie 群 G の局所的な性質は方程式(8.2.11)を解くことによってすべて求めることができる．すなわち n^3 個の実数係数 $C_{jk}{}^m$ $(j, k, m=1, \cdots, n)$ は(8.2.10)によって G の‘乗積表’(8.1.2)から導かれるから，$\hat{A}_1, \cdots, \hat{A}_n$ を‘未知数’と見立てて(8.2.11)を代数的に解けばよい．一般に集合 $\mathfrak{A}$ について

$$x \in \mathfrak{A},\ \ y \in \mathfrak{A} \Longrightarrow \alpha x + \beta y \in \mathfrak{A}, \qquad (\alpha, \beta \in K)$$
$$x \cdot y \in \mathfrak{A}$$

なる演算 ＋ と・が定義されていてそれらが

$$(x_1 + x_2) \cdot y = x_1 \cdot y + x_2 \cdot y \qquad (x_1, x_2, y \in \mathfrak{A})$$
$$x \cdot (y_1 + y_2) = x \cdot y_1 + x \cdot y_2 \qquad (x, y_1, y_2 \in \mathfrak{A})$$
$$\alpha(x \cdot y) = (\alpha x) \cdot y = x \cdot (\alpha y) \qquad (\alpha \in K)$$

を満たすとき $\mathfrak{A}$ を数体 K 上の**代数**(algebra)という．(8.2.11)を眺め，演算・を Lie の積 [,] で定義すれば，$\hat{A}_1, \cdots, \hat{A}_n$ で張られるベクトル空間は代数になっていることがわかる．この場合係数は一見複素数であるように見えるが，実は $\hat{A}_j$ として量子力学への応用を考え Hilbert 空間での自己共役演算子の表現をとっているので(8.2.9)の右辺，したがって(8.2.11)の左辺に i が表れたのである

実パラメーター $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ をもつ Lie 群は本来局所的に $\exp[\alpha_1 X_1 + \cdots + \alpha_n X_n]$ で表される．われわれは形式的に $\alpha_1 X_1 = -i\alpha_1(iX_1)$ とおいたに過ぎない．それゆえ，上記代数は実数体上の代数なのである．この代数のことを**実 Lie 群 G の実 Lie 代数**と呼び $\mathfrak{G}$ で表す．$\mathfrak{G}$ はまた **Lie 環**(Lie ring) と呼ばれることがある．今後はとくに断らない限り実 Lie 代数を単に Lie 代数と書く．Lie 代数 $\mathfrak{G}$ の構造は n^3 個の実係数 $C_{jk}{}^m$ できまるから $\{C_{jk}{}^m : j, k, m=1, \cdots, n\}$ を Lie 代数 $\mathfrak{G}$ の**構造定数**(structure constant) という．ただしそれらの値は，もとの Lie 群 G のパラメーターの入れ方，すなわち Lie 代数 $\mathfrak{G}$ の基底の選び方によるから注意しなくてはならない．しかし基底の選び方によらない次の関係がある．まず

$$C_{jk}{}^m = -C_{kj}{}^m \tag{8.2.12}$$

は自明だが，Jacobi の恒等式と (8.2.11) から

$$\sum_{m=1}^{n} (C_{ij}{}^m C_{mk}{}^l + C_{jk}{}^m C_{mi}{}^l + C_{ki}{}^m C_{mj}{}^l) = 0 \tag{8.2.13}$$

がえられる．

こうして Lie 群 G の局所的な性質を調べるにはその Lie 代数 $\mathfrak{G}$ の構造を明らかにする必要があることがわかったが，ここで注意しておきたいのは集合 $\{\hat{A}_1, \cdots, \hat{A}_n\}$ は群にはなっていない点である．定義(8.2.1)あるいは(8.2.2)から $\hat{A}_i$ は Lie 群 G の表現の**無限小演算子**(infinitesimal operator)になっているから $\hat{A}_i$ 自身も群の元であるような錯覚を起こしやすい．量子力学でよく使われるのは Lie 群そのものではなく，それから導かれた Lie 代数 $\mathfrak{G}$ である．このことは後で例をあげて詳しく説明することになろう．

Lie 群 G が与えられればその Lie 代数 $\mathfrak{G}$ は一意的にきまるが，その逆は真ではない．それは $\mathfrak{G}$ の構造定数が G の乗積表の微分係数で与えられることからも察せられるであろう．しかしわれわれが力学系の対称性を探そうとするときそれを何かある Lie 群に求めるのは，平行移動や回転のように直観的にとらえられるものを除き，一般に非常に困難である．一方もし種々の Lie 代数の構造を統一的に分類整理しておくことができれば，素粒子の対称性などを調べる上で有用であろう．幸いある一定の制限のなかで，Lie 代数の分類および構造は完全に解明されている．その制限を説明するため 2, 3 の定義をまずのべる．

(i) Lie 代数 $\mathfrak{L}$ の部分集合 $\mathfrak{M}$ が

$$a, b \in \mathfrak{M} \Longrightarrow [a, b] \in \mathfrak{M}$$

なるとき$\mathfrak{M}$を$\mathfrak{L}$の**部分代数**(subalgebra)という.

(ii) $$a \in \mathfrak{M}, b \in \mathfrak{L} \Longrightarrow [a, b] \in \mathfrak{M}$$

なるとき$\mathfrak{M}$を$\mathfrak{L}$の**不変部分代数**(invariant subalgebra)あるいは**イデアル**(ideal)という.

(iii) $\mathfrak{L}$が$0, \mathfrak{L}$以外の可換な不変部分代数をもたないとき, $\mathfrak{L}$は**半単純**(semi-simple)であるという.

半単純性だけを仮定することによってLie代数の分類および構造が決められるというのは驚くべきことである(たとえば[Jacobson]参照).

§8.3 連続群の射線表現

これまでわれわれはLie群Gの元sにHilbert空間Hの規格化されたベクトルψに作用するユニタリー演算子$\hat{U}(s)$を対応させることによって群の表現を行ってきた. すなわち

$$s \longrightarrow \hat{U}(s) \quad (\forall s \in G) \tag{8.3.1}$$

$$\hat{U}(st) = \hat{U}(s)\,\hat{U}(t) \tag{8.3.2}$$

なる表現を用いてきた. これを**ベクトル表現**(vector representation)という. しかし力学系の量子力学的な純粋状態は正確にはHilbert空間の1つのベクトルではなく, **射線**(ray, Strahlen)とよばれるベクトルの集合$\{e^{i\alpha}\psi : \alpha \in \mathrm{R}\}$で表される. それゆえ量子力学としては状態と射線を1対1に対応させるような定式化が望ましい. もちろん, このような基本的問題は早くから気づかれていたし(1928年[Weyl] 1931年[Wigner]), 数学的にも有限群を射線に作用する演算子で表現することは, すでに1904年Schurによって詳しく調べられていた[Schur]. しかし連続群については比較的最近になって定式化が行われた(1952年[Bargmann]).

これまでの量子力学の取扱いでは射線というベクトルの集合の‘代表’としてどれか1つのベクトルを選んでそれにいろいろな演算を行ってもさして不都合を生じなかった. それはしばしば定数位相の任意性として, その都度適当に選ばれてきた. しかしこれからの議論にそれが通用するかどうかは疑問であり, ベクトル的取扱いの適用限界を調べておく必要があるだろう.

まず射線に関して必要ないくつかの演算を定義する. これからは$f_0, g_0 \in \mathrm{H}$に

対応する射線を $\boldsymbol{f}=\{e^{i\alpha}f_0:\alpha\in\mathsf{R}\}$，$\boldsymbol{g}=\{e^{i\beta}g_0:\beta\in\mathsf{R}\}$ のようにあらわすことにしよう．射線の内積は

$$\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g}\equiv|(f,g)|,\qquad f\in\boldsymbol{f},\ g\in\boldsymbol{g} \tag{8.3.3}$$

で定義する．(f,g) についてはこれまで通り．つぎに2つの射線 $\boldsymbol{f}$ と $\boldsymbol{g}$ の間の距離を

$$d(\boldsymbol{f},\boldsymbol{g})\equiv[2(1-\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g})]^{\frac{1}{2}} \tag{8.3.4}$$

で定義すると，これは $\boldsymbol{f}$ と $\boldsymbol{g}$ のそれぞれの中から任意に選んだベクトル f と g の距離 $\|f-g\|$ の最小値を与える．実際，$f=e^{i\alpha}f_0\in\boldsymbol{f}$，$g=e^{i\beta}g_0\in\boldsymbol{g}$，$(f_0,g_0)=e^{i\lambda}|(f_0,g_0)|$ とすると

$$\begin{aligned}\|f-g\|^2&=2(1-\mathrm{Re}\,(f,g))=2(1-\mathrm{Re}\,(e^{-i\alpha}e^{i\beta}e^{i\lambda}\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g}))\\&\geqq 2(1-\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g})\end{aligned} \tag{8.3.5}$$

である．ここに Re は実数部分をとることを意味する．(8.3.4) から

$$d(\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g})=0$$

ならば $\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g}=1$ であり，さらに (8.3.3) から

$$|(f,g)|=1$$

であり，Schwarz の不等式をベクトル f_0, g_0 について見ると

$$|(f_0,g_0)|\leqq\|f_0\|\cdot\|g_0\|=1$$

等号が成り立つのは $f_0=g_0$ の場合に限ることがわかる．それゆえこの場合 $\boldsymbol{f}=\boldsymbol{g}$ でなければならない．

射線に作用するユニタリー演算子 $\hat{\boldsymbol{U}}$ は次のように定義する．H のベクトルに作用する1つのユニタリー演算子を $\hat{U}$ としたとき

$$\hat{\boldsymbol{U}}=\{\omega\hat{U}:|\omega|=1,\ \omega\in\mathsf{C}\} \tag{8.3.6}$$

なる集合をユニタリー**射線演算子** (operator ray) と呼ぶ．そしてこの演算子 $\hat{\boldsymbol{U}}$ を射線 $\boldsymbol{f}$ に作用してえられる射線を

$$\hat{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{f}\equiv\{\hat{U}f:\hat{U}\in\hat{\boldsymbol{U}},\ f\in\boldsymbol{f}\} \tag{8.3.7}$$

また2つの射線演算子 $\hat{\boldsymbol{U}}$ と $\hat{\boldsymbol{V}}$ の積および $\hat{\boldsymbol{U}}$ の逆をそれぞれ

$$\hat{\boldsymbol{U}}\hat{\boldsymbol{V}}=\{\hat{U}\hat{V}:\hat{U}\in\hat{\boldsymbol{U}},\ \hat{V}\in\hat{\boldsymbol{V}}\} \tag{8.3.8}$$

$$\hat{\boldsymbol{U}}^{-1}=\{\hat{U}^{-1}:\hat{U}\in\hat{\boldsymbol{U}}\} \tag{8.3.9}$$

で定義する．これらの定義から

$$\hat{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{f}\cdot\hat{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{g}=\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g} \tag{8.3.10}$$

なること，したがって $d(\hat{U}f, \hat{U}g)=d(f, g)$ であることは明らかである．

これで連続群 G をユニタリー射線演算子で表現するための準備ができた．ここでいう表現とは次のような関係を満たすように $s\in G$ に $\hat{U}(s)$ を対応させることである：

$$\hat{U}(s)\,\hat{U}(t)=\hat{U}(st) \tag{8.3.11}$$

これを**ユニタリー射線表現**(unitary ray representation)という．有限群の場合は，射影変換の行列を用いて同様のことができるから，**射影表現**(projective representation)と呼ばれることもある．

(8.3.11)の関係をそれぞれの射線演算子から1つの元を選び(それを‘代表’と呼ぼう)それらの間の関係として表すと，一般に

$$\hat{U}(s)\,\hat{U}(t)=\omega(s,t)\,\hat{U}(st) \tag{8.3.12}$$

となる．ここに ω は群 G の元 s および t の複素数値関数で，その絶対値は1に等しい．明らかに ω は‘代表’の選び方によるからかなりの任意性をもっている．しかしユニタリー演算子 $\hat{U}$ は積に関して結合則を満たさねばならないから ω には次の条件が課せられている：

$$\omega(s,t)\,\omega(st,u)=\omega(t,u)\,\omega(s,tu) \tag{8.3.13}$$

この関係は $(\hat{U}(s)\,\hat{U}(t))\,\hat{U}(u)=\hat{U}(s)(\hat{U}(t)\,\hat{U}(u))$ に(8.3.12)を代入することによって簡単に導かれる．表現(8.3.11)の一意性を保証するためには，(8.3.13)の条件と両立するような $\omega(s,t)$ の同値関係を定義しておく必要がある．それは次のようにしてえられる．群 G の元 s の絶対値が1に等しい任意の複素数値関数を $\phi(s)$ として，

$$\begin{aligned}\hat{U}'(s)&=\phi(s)\,\hat{U}(s)\\ \hat{U}'(t)&=\phi(t)\,\hat{U}(t)\\ \hat{U}'(st)&=\phi(st)\,\hat{U}(st)\end{aligned}$$

をとり，

$$\hat{U}'(s)\,\hat{U}'(t)=\omega'(s,t)\,\hat{U}'(st)$$

とおき，(8.3.12)を代入すると

$$\omega'(s,t)=\omega(s,t)\frac{\phi(s)\phi(t)}{\phi(st)} \tag{8.3.14}$$

がえられる．これを ω と ω' の同値関係と定義すれば

$$\omega \sim \omega, \quad \omega \sim \omega' \Rightarrow \omega' \sim \omega, \quad \omega \sim \omega' \text{ かつ } \omega' \sim \omega'' \Rightarrow \omega \sim \omega''$$

なることは容易にたしかめられる．また(8.3.14)が(8.3.13)と両立することも明らかである．関数 ω のことを与えられた射線表現の**局所因子**(local factor)という．局所因子が1に同値な射線表現はベクトル表現に他ならない．その意味で射線表現はベクトル表現の**拡大**(extention)である．実際，もとの群 G を拡大してそのベクトル表現を求めると射線表現と同じ結果がえられる(群の拡大については，たとえば[浅野, 永尾] pp. 179-191 を参照されたい)．

そこで次の問題は，どのような場合に射線表現がベクトル表現と同値になるかを調べることである．この目的には次の定理が有用である．

[定理]　連続群 G の有限次元の連続な射線表現のすべての局所因子 ω は1と同値である．

この定理の証明のためには ω の連続性を調べておく必要がある．群空間の任意の点 α の近傍の性質を調べるためすべての元に α^{-1} をかけ，もとの点を原点 e に移す．$\hat{U}(e)=1$ として(8.3.12)を使うと

$$\omega(s,e)=\omega(e,s)=1, \qquad \forall s \in G \tag{8.3.15}$$

がえられる．原点の近傍 $\mathfrak{N}$ をとってその内部の点 s, t, s', t' について次の式を(8.3.12)を用いて変形する．以下 $\|f\|=1$ としておく．

$$(\omega(s',t')-\omega(s,t))\hat{U}(s't')f=\omega(s,t)(\hat{U}(st)-\hat{U}(s't'))f$$
$$+\hat{U}(s')(\hat{U}(t')-\hat{U}(t))f+(\hat{U}(s')-\hat{U}(s))\hat{U}(t)f \tag{8.3.16}$$

上式の両辺のノルムをとり，Minkowski の不等式を用いれば

$$|\omega(s',t')-\omega(s,t)| \leqq \|(\hat{U}(s't')-\hat{U}(st))f\|$$
$$+\|(\hat{U}(t')-\hat{U}(t))f\|+\|(\hat{U}(s')-\hat{U}(s))f\| \tag{8.3.17}$$

であるから，$\hat{U}(s)$ の強連続性によって $\omega(s,t)$ の連続性がたしかめられる．それゆえ近傍 $\mathfrak{N}$ で次のベキ級数

$$\ln \omega \equiv \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m}(\omega-1)^m \tag{8.3.18}$$

を定義することができる．さらに $-i \ln \omega = \xi$ とおけば $\omega=\exp[i\xi]$ となり，$|\omega|=1$ の条件から $\xi(s,t)$ は連続な実数値関数であることがわかる．ξ のことを群 G の**局所指数**(local exponent)という．ついでに $\phi(s)$ も実数値関数 $\zeta(s)$ を使って

$\phi(s)=\exp[i\zeta(s)]$ と表しておく.

ξ や ζ を用いると(8.3.14)は次のようになる:

$$\xi'(s,t)=\xi(s,t)+\zeta(s)+\zeta(t)-\zeta(st) \tag{8.3.19}$$

これで前記定理の証明の準備は完了した.

[証明] まず(8.3.12)を実数値関数 ξ を使って

$$\hat{U}(s)\hat{U}(t)=\exp[i\xi(s,t)]\hat{U}(st) \tag{8.3.20}$$

と表し，両辺の行列式をとる．仮定により $\hat{U}$ は有限次元の行列であるから，その次元を n とすると

$$D(s)D(t)=\exp[in\xi(s,t)]D(st) \tag{8.3.21}$$

がえられる．ここに $D(s)$ は $\hat{U}(s)$ の行列式であり $D(e)=1$, $|D(s)|=1$ は明らかである．さらに $\hat{U}(s)$ の連続性から $D(s)$ も連続であることを考えると，$D(s)=\exp[i\delta(s)]$ とおくことができる．ここに $\delta(s)$ は実数値関数である．そうすれば(8.3.21)は

$$\delta(s)+\delta(t)=n\xi(s,t)+\delta(st) \tag{8.3.22}$$

となる．そこで $\hat{U}'(s)=\exp[i\zeta(s)]\hat{U}(s)$ における $\zeta(s)$ として $\zeta(s)=-\delta(s)/n$ を用い，これを(8.3.19)に代入し(8.3.22)を考慮すると $\xi'(s,t)=0$, すなわち

$$\hat{U}'(s)\hat{U}'(t)=\hat{U}'(st)$$

がえられる． [証明終り]

この定理の仮定が成り立つ連続群については，始めからベクトル表現で話をすればよいことがわかったが，残念ながら量子力学で使われる連続群の多くは上記仮定を満たしていない．よくわかっている連続群でこの条件を満たしているのはコンパクトな半単純 Lie 群であるが，われわれに身近なものとしては回転群ぐらいのものである．半単純 Lie 群とは前にのべた半単純 Lie 代数をもつ Lie 群のことであり，コンパクトとは群空間 G の任意の**開被覆**(open covering)に対してその細分(refinement)として有限開被覆(finite open covering)がとれるものをいう．1次元実数空間でいうと閉区間に相当する.

たとえば次節で扱う3次元 Euclid 空間の平行移動は Lie 群をつくるが，その1パラメーター部分群といえどもコンパクトではない．実際，x 軸にそって τ だけ動かす操作を $g(\tau)$ であらわせば，τ の定義域は開区間，すなわち τ は $-\infty$ から ∞ まで変わりうるから**ノン・コンパクト**(non-compact)であり，有限次元の

行列で表せない．したがって上の定理の適用範囲の外にある．これに反し3次元Euclid空間の回転は3個のパラメーターで表せそれらの定義域はいずれも閉区間で，かつ有限次元の行列で表現できる．それゆえ，上の定理により回転群の局所的表現については始めからベクトル表現を採用して差支えない．このことは次節で行うように具体的に回転群のLie代数を導き，その上で1に同値な局所因子を求めることによって直接示すことができる．

しかしそのためには前節で取り扱ったn個のパラメーターをもつLie群Gの射線表現の局所的な性質を求めておかねばならない．(8.2.5)に相当する式は(8.3.12)の局所因子ωを局所指数ξで表した

$$\exp[i\alpha_j\hat{A}_j]\exp[i\beta_k\hat{A}_k]$$
$$=\exp[i\xi(0,\cdots,\alpha_j,\cdots,0;\ 0,\cdots,\beta_k,\cdots,0)]\hat{U}(f_1,\cdots,f_n)$$

である．前と同様の計算を行うと

$$i[\hat{A}_j,\hat{A}_k]=\sum_{m=1}^{n}C_{jk}{}^{m}\hat{A}_m+\beta_{jk}\cdot\mathbf{1} \tag{8.3.23}$$

がえられる．$C_{jk}{}^{m}$は(8.2.10)で与えられたものと同じであり，新しくあらわれたβ_{jk}は

$$\beta_{jk}=\left(\frac{\partial^2\xi}{\partial\beta_k\partial\alpha_j}-\frac{\partial^2\xi}{\partial\beta_j\partial\alpha_k}\right)_{\substack{\alpha_l=0\\ \beta_l=0}} \tag{8.3.24}$$

で定義される．明らかに$\beta_{jk}=-\beta_{kj}$，また(8.3.23)とJacobiの恒等式から

$$\sum_{m=1}^{n}(C_{ij}{}^{m}\beta_{km}+C_{jk}{}^{m}\beta_{im}+C_{ki}{}^{m}\beta_{jm})=0 \tag{8.3.25}$$

がえられる．

§8.4 運動量と角運動量

前節でのべた連続群の射線表現の最初の応用例として3次元Euclid空間における平行移動を考えよう．3次元の実ベクトル$\boldsymbol{a}=(a_x,a_y,a_z)$，$\boldsymbol{b}=(b_x,b_y,b_z)$をとり座標系を$\boldsymbol{a}$だけ平行移動する操作を$g(a_x,a_y,a_z)$で表せば$g(b_x,b_y,b_z)g(a_x,a_y,a_z)=g(a_x+b_x,a_y+b_y,a_z+b_z)$なることはいうまでもない．これはすべての$g$の集まり$G$が3個のパラメーターをもつ可換なLie群になっていることを示す．したがって(8.3.23)より$a_x=a_1$，$a_y=a_2$，$a_z=a_3$のように書くと

$$i[\hat{A}_j, \hat{A}_k] = \beta_{jk}\cdot\mathbf{1} \qquad (8.4.1)$$

となる．ベクトル表現では可換であった演算子 $\hat{A}_j, \hat{A}_k$ が射線表現ではもはや可換ではない，というのはいささかショッキングである．念のため $\beta_{12}=\kappa_3$，$\beta_{23}=\kappa_1$，$\beta_{31}=\kappa_2$ とおいて $(\beta_{ii}=0)$，(8.3.26) を用いて群 G の表現を求めておこう．それは

$$\begin{aligned}&\hat{U}(a_1, a_2, a_3)\hat{U}(b_1, b_2, b_3)\\&\quad= \exp\left[i\left\{\frac{\kappa_1}{2}(a_2b_3-a_3b_2)+\frac{\kappa_2}{2}(a_3b_1-a_1b_3)+\frac{\kappa_3}{2}(a_1b_2-a_2b_1)\right\}\right]\\&\qquad\cdot\hat{U}(a_1+b_1, a_2+b_2, a_3+b_3)\end{aligned} \qquad (8.4.2)$$

となり，$\kappa_1=\kappa_2=\kappa_3=0$ あるいは $\boldsymbol{a}/\!/\boldsymbol{b}$ の場合を除き

$$\hat{U}(a_1, a_2, a_3)\hat{U}(b_1, b_2, b_3) \neq \hat{U}(b_1, b_2, b_3)\hat{U}(a_1, a_2, a_3)$$

である．$\boldsymbol{a}/\!/\boldsymbol{b}$ の場合は $\boldsymbol{a}$ の方向に x 軸をとればわかるように1個のパラメーターの部分群をとったことにあたる．1個のパラメーターをもつ可換な Lie 群ならば，つねにベクトル表現と同値になることは $\beta_{11}\equiv 0$ から自明である．古典力学では任意の2つの平行移動の順序をかえても結果に変りがなかったからといって，この概念を量子力学に押しつけることはむろんできない．せっかくこれまで射線表現の一般論を論じてきたのだから，その枠組の中で3次元 Euclid 空間の平行移動をベクトル表現してよい根拠を探ろう．それには3次元 Euclid 空間の回転群を考えるのがよい．

3次元 Euclid 空間にとった2つの直交座標系 Σ, Σ' は平行移動と回転によってお互いに他に移ることができる．すなわち原点を平行移動し，つぎに原点を固定して座標軸を直交性を保ちながら他に重ね合せるようにすればよい．この全体の操作をまとめて扱うことは後まわしにして，とりあえず原点を固定して直交性を保ちながら座標系を連続的に移動させることを考える．このような操作の全体をとれば，それが群になっており，各元が行列式が1に等しくかつ転置行列が逆行列に等しい3次の実正方行列で表されることは，いまさらいうまでもあるまい．この群を $SO(3)$ で表す．群 $SO(3)$ の局所的構造を調べるにはこの群の Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ を作ってみればよい．代数の構造は表現によらないから3次の実正方行列を使って，単位元の近傍の任意の元を表してみよう．それは $\varepsilon_i \ll 1$ $(i=1, 2, 3)$ を用いて簡単な計算により

$$\begin{bmatrix} 1 & -\varepsilon_3 & \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 & 1 & -\varepsilon_1 \\ -\varepsilon_2 & \varepsilon_1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} + \varepsilon_1 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} + \varepsilon_2 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \varepsilon_3 \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

となる．そこで

$$\hat{B}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{B}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \hat{B}_3 = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad (8.4.3)$$

とおくと，直ちに

$$[\hat{B}_1, \hat{B}_2] = \hat{B}_3, \quad [\hat{B}_2, \hat{B}_3] = \hat{B}_1, \quad [\hat{B}_3, \hat{B}_1] = \hat{B}_2 \qquad (8.4.4)$$

がえられる．

こうして $SO(3)$ の Lie 代数の構造がわかったが，前節の説明とうまくつながるようにするため，2 つの代数の間の同型概念に触れておこう．一般に代数 $\mathfrak{g}_1, \mathfrak{g}_2$ のそれぞれの元を 1 対 1 に対応させる線形写像 f があって $X, Y \in \mathfrak{g}_1$ に対しつねに $f([X, Y]) = [f(X), f(Y)]$ が成り立つとき，$\mathfrak{g}_1, \mathfrak{g}_2$ は**同型**(isomorphic)であるという．(8.4.4)で与えられる代数と

$$i[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = \hat{A}_3, \quad i[\hat{A}_2, \hat{A}_3] = \hat{A}_1, \quad i[\hat{A}_3, \hat{A}_1] = \hat{A}_2 \qquad (8.4.5)$$

で与えられる代数とは，写像 $\hat{A}_j = f(\hat{B}_j) = -i\hat{B}_j$ $(j=1, 2, 3)$ によって容易にたしかめられる．(8.4.3)からわかるように $\hat{B}_j$ $(j=1, 2, 3)$ は反対称行列であるから $\hat{A}_j$ $(j=1, 2, 3)$ は Hermite 行列になっており，量子力学では都合がよい．

いよいよ $SO(3)$ の局所的なユニタリー射線表現を求めることになるが，前節で導いた一般式(8.3.23)に現れる構造定数 $C_{jk}{}^m$ としては(8.4.5)からえられる

$$C_{12}{}^3 = C_{23}{}^1 = C_{31}{}^2 = 1, \qquad \text{その他の } C_{jk}{}^m = 0$$

を，また $\beta_{12} \equiv \beta_3$, $\beta_{23} \equiv \beta_1$, $\beta_{31} \equiv \beta_2$ なる記号を用いることにより，

$$i[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = \hat{A}_3 + \beta_3, \quad i[\hat{A}_2, \hat{A}_3] = \hat{A}_1 + \beta_1, \quad i[\hat{A}_3, \hat{A}_1] = \hat{A}_2 + \beta_2 \qquad (8.4.6)$$

がえられる．上式で

$$\hat{A}_j+\beta_j=\hat{A}_j' \tag{8.4.7}$$

なる変換を行えば

$$i[\hat{A}_1', \hat{A}_2']=\hat{A}_3', \quad i[\hat{A}_2', \hat{A}_3']=\hat{A}_1', \quad i[\hat{A}_3', \hat{A}_1']=\hat{A}_2' \tag{8.4.8}$$

となり，ベクトル表現と同じになる．前節で局所因子の同値関係を説明するときに用いた $\phi(s)$ として $\exp[i\alpha_j\beta_j]$ $(j=1,2,3)$ をとれば，(8.4.7) なる変換は同値性を保存することが直接示される．

こうして $SO(3)$ のユニタリー射線表現は局所的にはベクトル表現と同値であることが確認されたので，前に約束した平行移動群の射線表現との関係を調べることにしよう．3次元 Euclid 空間の実ベクトル $\boldsymbol{x}=(x_1, x_2, x_3)$ の長さを変えない一般的な変換は

$$\boldsymbol{x}'=R\boldsymbol{x}+\boldsymbol{u} \tag{8.4.9}$$

で表される．ここに R は回転をあらわす行列，$\boldsymbol{u}$ は原点の移動を与えるベクトルである．すなわち(8.4.9)の変換はまず原点のまわりの回転 R を行い，つぎに原点を $\boldsymbol{u}$ だけずらす操作をまとめて書いたものである．やや技巧的であるが，(8.4.9)は4次の実正方行列を使って

$$\begin{bmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \\ 1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} & u_1 \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} & u_2 \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} & u_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ 1 \end{bmatrix}\equiv\begin{bmatrix} R & \boldsymbol{u} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ 1 \end{bmatrix} \tag{8.4.10}$$

のように表すことができる．実際，(8.4.9)の変換に続けて

$$\boldsymbol{x}''=R'\boldsymbol{x}'+\boldsymbol{u}' \tag{8.4.9$'$}$$

を行えば

$$\boldsymbol{x}''=R'R\boldsymbol{x}+R'\boldsymbol{u}+\boldsymbol{u}' \tag{8.4.11}$$

であるが，これは行列の掛け算

$$\begin{bmatrix} R' & \boldsymbol{u}' \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} R & \boldsymbol{u} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} R'R & R'\boldsymbol{u}+\boldsymbol{u}' \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{8.4.12}$$

になっている．R をすべての回転行列，$\boldsymbol{u}$ をすべてのベクトルとした場合，行列

$$g(R, \boldsymbol{u})=\begin{bmatrix} R & \boldsymbol{u} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{8.4.13}$$

のすべての集合が行列の掛け算に関して6パラメーターの Lie 群になっているこ

との検証は容易である．念のため単位元および逆元を書いておく：

$$e = g(\mathbf{1}, 0) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \qquad g^{-1}(R, \boldsymbol{u}) = \begin{bmatrix} R^{-1} & -R^{-1}\boldsymbol{u} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

この群は**非斉次1次変換群**(inhomogeneous linear transformation group)の1つで $I_3{}^3$ と書かれる．$I_3{}^3$ が部分群 $G_3{}^3=\{g(R,0)\}$，$T_3=\{g(\mathbf{1},\boldsymbol{u})\}$ をもつことは簡単に確かめられる．注目すべきことは，T_3 は不変部分群になっているが，$G_3{}^3$ はそうではないという点である．実際，

$$g(R_0, \boldsymbol{u}_0)\begin{bmatrix} R & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} g^{-1}(R_0, \boldsymbol{u}_0) = \begin{bmatrix} R_0RR_0{}^{-1} & -R_0RR_0{}^{-1}\boldsymbol{u}_0+\boldsymbol{u}_0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \notin G_3{}^3 \tag{8.4.14}$$

$$g(R_0, \boldsymbol{u}_0)\begin{bmatrix} 1 & \boldsymbol{u} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} g^{-1}(R_0, \boldsymbol{u}_0) = \begin{bmatrix} 1 & R_0\boldsymbol{u} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \in T_3 \tag{8.4.15}$$

$G_3{}^3$, T_3 がそれぞれ前に調べた回転群，平行移動群になっていることはいうまでもあるまい．T_3 が不変部分群であることから剰余群 $I_3{}^3/T_3$ が作れる．2つの群が演算関係について1対1対応がつくとき**同型**(isomorphic)といって $\cong$ なる記号で結びつけるが，この場合

$$I_3{}^3/T_3 \cong G_3{}^3 \tag{8.4.16}$$

になっていることは容易に確かめられる．

われわれはこれまで $G_3{}^3$ と T_3 を別々に扱ってそれぞれの射線表現を調べた．しかし，いうまでもなく物理的に意味のある変換は $I_3{}^3$ である．しかもこの中で $G_3{}^3$ は不変部分群ではない．一方，$G_3{}^3$ の射線表現はベクトル表現と同値であることを証明した．そして $T_3{}^3$ の射線表現は**一般には**ベクトル表現と同値でないことも見てきた．だが後者はベクトル表現と同値な類の存在を否定するものではなかった．すなわち(*8.4.2*)において $\kappa_1=\kappa_2=\kappa_3=0$ととることは許されている．それゆえ T_3 の射線表現は $I_3{}^3$ の射線表現の中に含まれるものとしては，ベクトル表現と同値なものを採用せざるをえなくなったとしても矛盾は起こらない．ところで以下証明するように，“$I_3{}^3$ の Lie 代数の射線表現はベクトル表現と同値である”[Bargmann の定理]．したがってその部分群としての T_3 の Lie 代数の射

線表現は当然ベクトル表現と同値になる．

［証明］　まず I_3^3 の Lie 代数の構造を書き下しておこう．これまでは回転群および平行移動群を座標系の変換群として扱ってきたが，ここでは物理的意味をはっきりさせるため，空間のすべての点が，固定された座標系の中で行う移動を考える．これはこれまで扱った回転角の符号および平行移動ベクトルの向きを反対にすることにあたる．x_j 軸 $(j=1, 2, 3)$ のまわりに微小角 θ_j の回転を，x_j 軸方向に微小変位 δ_j を行う I_3^3 の元が

$$g(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \delta_1, \delta_2, \delta_3) = 1+\theta_1\begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & -1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}+\theta_2\begin{bmatrix} \cdot & \cdot & -1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}$$

$$+\theta_3\begin{bmatrix} \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ -1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}+\delta_1\begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}$$

$$+\delta_2\begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}+\delta_3\begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}$$

$$\equiv 1+\sum_{j=1}^{3}\theta_j R_j+\sum_{j=1}^{3}\delta_j T_j \tag{8.4.17}$$

と表されることは説明するまでもないだろう．行列要素の点・は 0 を表す．これから I_3^3 の Lie 代数の構造を直接計算によって求めることができる．見やすいようにすべての交換関係をつぎに列記する．

$$[R_1, R_2] = -R_3, \quad [R_2, R_3] = -R_1, \quad [R_3, R_1] = -R_2 \tag{8.4.18}$$

$$\left.\begin{array}{lll} [R_1, T_1] = 0, & [R_1, T_2] = -T_3, & [R_1, T_3] = T_2 \\ [R_2, T_1] = T_3, & [R_2, T_2] = 0, & [R_2, T_3] = -T_1 \\ [R_3, T_1] = -T_2, & [R_3, T_2] = T_1, & [R_3, T_3] = 0 \end{array}\right\} \tag{8.4.19}$$

$$[T_1, T_2] = 0, \quad [T_2, T_3] = 0, \quad [T_3, T_1] = 0 \tag{8.4.20}$$

予想通り，微小回転演算子 R_j と微小平行移動演算子 T_k とは $j \neq k$ ならば可換で

はない.

ここで一般論とのつながりを考慮して $A_j=R_j$ $(j=1,2,3)$, $A_j=T_{j-3}$ $(j=4,5,6)$ とおくと, *(8.4.18)*, *(8.4.19)*, *(8.4.20)* は

$$[A_j, A_k]=\sum_{m=1}^{6} C_{jk}{}^m A_m$$

とまとめて書くことができる. この Lie 代数のユニタリー射線表現を $D(A_j)$ とすれば(前には繁雑を避けるため, またその必要もなかったので D を省いた), *(8.3.23)* より

$$i[D(A_j), D(A_k)]=\sum_{m=1}^{6} C_{jk}{}^m D(A_m)+\beta_{jk}\cdot 1 \qquad (8.4.21)$$

となり, 一般に 0 でない実数の定数 $\beta_{jk}=-\beta_{kj}$ $(j,k=1,\cdots,6)$ が ${}_6C_2=15$ 個現れる. 問題は §8.3 で述べた同値変換によってそれらすべての β_{jk} を消すことができるか, ということである. これを調べるには Bargmann が導入したつぎの関数を用いるのが便利である.

(8.4.21) から明らかなように, β_{jk} は $[D(A_j), D(A_k)]$ を通じ, この Lie 代数の元 A_j および A_k によって, その順序を含めて一意的にきまる実数であるから

$$\beta_{jk}=\Xi(A_j, A_k) \qquad (8.4.22)$$

と書くことができる. すなわち

$$I_3{}^3 \text{ の Lie 代数} \ni A_j, A_k \longmapsto [D(A_j), D(A_k)] \longmapsto \beta_{jk}=\Xi(A_j, A_k)\in \mathrm{R}$$

なる代数から実数体への写像を Ξ で表す. もし A_k, A_l がともにこの Lie 代数の元ならば $[A_k, A_l]$ もこの Lie 代数の元であるから

$$A_j, [A_k, A_l] \longmapsto [D(A_j), D([A_k, A_l])] \longmapsto \Xi(A_j, [A_k, A_l])$$

一方, D は Lie 代数の表現であるから当然

$$D([A_k, A_l])=[D(A_k), D(A_l)] \qquad (8.4.23)$$

を満たしている. それゆえ Jacobi の恒等式

$$[D(A_l), [D(A_j), D(A_k)]] \\ +[D(A_j), [D(A_k), D(A_l)]]+[D(A_k), [D(A_l), D(A_j)]]=0$$

に対応して

$$\Xi(A_l, [A_j, A_k])+\Xi(A_j, [A_k, A_l])+\Xi(A_k, [A_l, A_j])=0 \qquad (8.4.24)$$

が成り立っている. $\Xi(A_j, A_k)=-\Xi(A_k, A_j)$ は自明であろう. これで証明の準

備は整った.

まず(8.4.20)の射線表現を調べる. (8.4.19)と(8.4.24)を用いて

$$\begin{aligned}2\beta_{45} &= 2\Xi(T_1, T_2) = \Xi(T_1, [R_1, T_3]) + \Xi(T_1, [T_1, R_3]) \\ &= -\Xi(R_1, [T_3, T_1]) - \Xi(T_3, [T_1, R_1]) \\ &\quad -\Xi(T_1, [R_3, T_1]) - \Xi(R_3, [T_1, T_1]) \\ &= \Xi(T_1, T_2) = \beta_{45}\end{aligned}$$

$$\therefore \quad \beta_{45} = 0, \qquad \text{同様にして} \qquad \beta_{56} = \beta_{64} = 0$$

がえられる. つぎに(8.4.19)のうち右辺が0であるものの射線表現を調べる.

$$\begin{aligned}2\beta_{14} &= 2\Xi(R_1, T_1) = \Xi(R_1, [R_3, T_2]) + \Xi(R_1, [T_3, R_2]) \\ &= -\Xi(R_3, [T_2, R_1]) - \Xi(T_2, [R_1, R_3]) \\ &\quad -\Xi(T_3, [R_2, R_1]) - \Xi(R_2, [R_1, T_3]) \\ &= 0, \qquad \text{同様にして} \qquad \beta_{25} = \beta_{36} = 0\end{aligned}$$

(8.4.19)の残りについては

$$\begin{aligned}2\beta_{15} &= 2\Xi(R_1, T_2) = \Xi(R_1, [R_1, T_3]) + \Xi(R_1, [T_1, R_3]) \\ &= -\Xi(R_1, [T_3, R_1]) - \Xi(T_3, [R_1, R_1]) \\ &\quad -\Xi(T_1, [R_3, R_1]) - \Xi(R_3, [R_1, T_1]) \\ &= \Xi(R_1, T_2) - \Xi(R_2, T_1) \\ &= \beta_{15} - \beta_{24}\end{aligned}$$

$$\therefore \quad \beta_{15} = -\beta_{24}, \qquad \text{同様にして} \qquad \beta_{34} = -\beta_{16}, \qquad \beta_{26} = -\beta_{35}$$

そこで $\beta_{12}=\beta_3$, $\beta_{23}=\beta_1$, $\beta_{31}=\beta_2$, $\beta_{15}=\beta_4$, $\beta_{34}=\beta_5$, $\beta_{26}=\beta_6$ とおき

$$D(R_i) \longrightarrow D'(R_i) = D(R_i) - \beta_i \cdot 1 \qquad (i=1,2,3) \tag{8.4.25}$$

$$D(T_i) \longrightarrow D'(T_i) = D(T_i) - \beta_{3+i} \cdot 1 \qquad (i=1,2,3) \tag{8.4.26}$$

なる同値変換を行うと((8.4.7)参照), すべての β_{jk} は消える. [証明終り]

以上述べた定理およびその証明は, さらに一般的な場合, すなわち n 次元の実線形空間で

$$F_p = \sum_{i=1}^{p} x_i^2 - \sum_{i=p+1}^{n} x_i^2 \tag{8.4.27}$$

を不変にする非斉次1次変換の群 I_p^n $(n>2)$ についても成り立つ†([Bargmann]

---

† $n>2$ の条件は重要である. $x^2-c^2t^2=$不変はたしかに Lorentz 群の部分群になっているが, これを非斉次変換にしても射線表現とベクトル表現の同値性は導かれない.

§6 あるいは [Hamermesh] §12 参照). われわれにとって興味があるのは I_3^4 である. これは Minkowski 空間における非斉次固有 Lorentz 変換群, すなわち Poincaré 群に他ならない. Poincaré 群は 10 個の実パラメーターをもつノン・コンパクトな Lie 群であるが, その Lie 代数の構造は I_3^3 のそれと酷似しており, 上に述べた証明法をほとんどそのまま適用することができる. 一見面倒なようであるが, 実際行ってみると非常に簡単である. 読者は自ら証明を試みられたい.

念のため Poincaré 群の Lie 代数の構造を記しておこう. Poincaré 群の元は (8.4.13) にならって

$$g(W, \boldsymbol{u}) = \begin{pmatrix} W & \boldsymbol{u} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{8.4.28}$$

で表される. ここに W は固有 Lorentz 変換, $\boldsymbol{u}$ は 4 元ベクトル ($x_1=x$, $x_2=y$, $x_3=z$, $x_4=ct$) である. 無限小 Poincaré 変換を

$$\begin{aligned} g(\varepsilon_1, \cdots, \varepsilon_{10}) = \mathbf{1} &+ \varepsilon_1 A_1 + \varepsilon_2 A_2 + \varepsilon_3 A_3 + \varepsilon_4 B_1 + \varepsilon_5 B_2 + \varepsilon_6 B_3 \\ &+ \varepsilon_7 C_1 + \varepsilon_8 C_2 + \varepsilon_9 C_3 + \varepsilon_{10} C_4 \end{aligned} \tag{8.4.29}$$

$$A_1 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & -1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix},$$

$$A_3 = \begin{bmatrix} \cdot & -1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}, \quad B_1 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix},$$

$$B_2 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}, \quad B_3 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix},$$

$$C_1=\begin{bmatrix}\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&1\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\end{bmatrix},\quad C_2=\begin{bmatrix}\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&1\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\end{bmatrix}$$

$$C_3=\begin{bmatrix}\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&1\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\end{bmatrix},\quad C_4=\begin{bmatrix}\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&1\\\cdot&\cdot&\cdot&\cdot&\cdot\end{bmatrix}$$

と表せば

$$[A_1, A_2]=A_3,\qquad [A_2, A_3]=A_1,\qquad [A_3, A_1]=A_2 \tag{8.4.30}$$

$$[B_1, B_2]=-A_3,\qquad [B_2, B_3]=-A_1,\qquad [B_3, B_1]=-A_2 \tag{8.4.31}$$

$$\left.\begin{aligned}&[A_1, B_2]=B_3,\qquad [A_1, B_3]=-B_2,\qquad [A_2, B_1]=-B_3\\&[A_2, B_3]=B_1,\qquad [A_3, B_1]=B_2,\qquad [A_3, B_2]=-B_1\end{aligned}\right\} \tag{8.4.32}$$

$$\left.\begin{aligned}&[A_1, C_2]=C_3,\qquad [A_1, C_3]=-C_2,\qquad [A_2, C_1]=-C_3\\&[A_2, C_3]=C_1,\qquad [A_3, C_1]=C_2,\qquad [A_3, C_2]=-C_1\end{aligned}\right\} \tag{8.4.33}$$

$$\left.\begin{aligned}&[B_1, C_1]=C_4,\qquad [B_2, C_2]=C_4,\qquad [B_3, C_3]=C_4\\&[B_1, C_4]=C_1,\qquad [B_2, C_4]=C_2,\qquad [B_3, C_4]=C_3\end{aligned}\right\} \tag{8.4.34}$$

他のすべての交換子は0, がえられる. (*8.4.30*)は(*8.4.18*)と右辺の符号が異なっているが, これは座標系の変換をとったからで, 代数の構造には変りはない. (*8.4.32*)と(*8.4.33*)が代数として全く同じ形になっているため, I_3^3の証明がそのまま使えるのである.

ところで量子力学で使われるベクトル空間はすでに学んだように Hilbert 空間 H と呼ばれる線形の関数空間である. Hilbert 空間の厳密な定義および諸性質の数学的取扱いは第VI部第16章に譲り, ここでは直観的な説明にとどめる. なお量子力学的状態がなぜベクトルで表されなければならないかの情報理論的な意味づけは第VII部第20章で行われる.

われわれの当面の関心は3次元 Euclid 空間における直交座標系 Σ の平行移動あるいは回転による変換のそれぞれの群を Hilbert 空間のベクトルに作用するユ

ニタリー演算子で表現することである．すなわち群 G の任意の元 g に H の元 ψ に作用するユニタリー演算子 $\hat{U}(g)$ を対応させることである．式で書けば

$$\psi \longrightarrow \psi' = \hat{U}(g)\psi$$
$$(\psi', \psi') = (\hat{U}\psi, \hat{U}\psi) = (\psi, \psi) = 1$$
$$g_1, g_2 \in G \Longrightarrow \hat{U}(g_1)\hat{U}(g_2) = \hat{U}(g_1 g_2)$$

となるような $\hat{U}(g)$ を求めることである．ここで注意しておきたいのは，量子力学で用いられる Hilbert 空間なるものはあくまで物理系の状態を記述するための思考上の工夫であり，それゆえにできるだけ包括的かつ便利なものが望ましいという点である．Hilbert 空間の元であるベクトルは公理系(第 VI 部第 16 章参照)を満たすものであれば何でもよい．それは 3 次元 Euclid 空間の座標 $\boldsymbol{x}$ の関数 $\psi(x_1, x_2, x_3)$ であってもよいし，2 次元の複素空間の 2 成分ベクトルであってもよい．関数 ψ にしても必ずしも各点で連続とか各点で微分可能であることも要求されていない．すでに見てきたように(§2.4)，われわれは階段ポテンシャルのような不連続関数を活用してきた．有限個あるいは可付番個の点での不連続性などは問題ではない．積分やその逆としての微分が支障なく行われるように関数を拡げておくのが望ましいのである．それは積分として Lebesgue 積分，連続として絶対連続を用いることによって可能である．いささか奇異に感じられるかもしれないが ψ は無数の点で定義されていなくとも，したがってもちろん微分可能でない点が無数にあったとしても，そのような点の Lebesgue 測度が 0 であれば一向に差支えないのである．というよりこのように数学的手法の枠を拡げておかないと，われわれの物理的思考を十分に働かせることができないのである．その好例が，後に述べる軌道角運動量は何故 $\hbar$ の整数倍の値しかとれないか，という問題である．

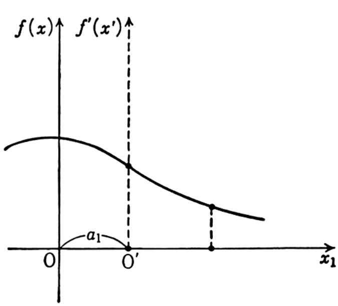


図 8.1

まず 3 次元空間の座標 $\boldsymbol{x}$ のいたるところで連続かつ何回でも微分可能な複素数値関数 $\psi(x_1, x_2, x_3)$ でつくられる Hilbert 空間で平行移動群や回転群を局所的にベクトル表現することを試みる．そのためには簡単な実数値関数 $f(x_1)$

($x_1 \in \mathrm{R}$) が座標系の平行移動によってどう変換されるかを見ておくのがよい.

座標系の原点を a_1 だけずらしたときの変数および関数をそれぞれ x_1', $f'(x_1')$ と書けば, 図 8.1 からわかるように

$$f'(x_1') = f(x_1 - a_1)$$

である. 複素数値関数 ψ についても実数部分と虚数部分について上の議論がそのまま成り立つから

$$\boldsymbol{x} \longrightarrow \boldsymbol{x}' = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{a} \quad \text{に対し} \quad \psi(\boldsymbol{x}) \longrightarrow \psi'(\boldsymbol{x}') = \psi(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{a}) \tag{8.4.35}$$

である. 座標系の回転に対しても同様に

$$\boldsymbol{x} \longrightarrow \boldsymbol{x}' = R\boldsymbol{x} \quad \text{に対し} \quad \psi(\boldsymbol{x}) \longrightarrow \psi'(\boldsymbol{x}') = \psi(R^{-1}\boldsymbol{x}) \tag{8.4.36}$$

と表すことができる.

それゆえ座標系を x_1 軸方向に微小平行移動する変換は (8.4.35) を Taylor 展開して

$$\psi(x_1, x_2, x_3) \longrightarrow \psi(x_1 - a_1, x_2, x_3)$$
$$= \left(1 - a_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{(a_1)^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial {x_1}^2} - \frac{(a_1)^3}{3!} \frac{\partial^3}{\partial {x_1}^3} + \cdots\right) \psi(x_1, x_2, x_3) \tag{8.4.37}$$

で表される. ここで

$$\exp\left[-a_1 \frac{\partial}{\partial x_1}\right] \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-a_1 \frac{\partial}{\partial x_1}\right)^n \tag{8.4.38}$$

と定義すると (8.4.37) は

$$\begin{aligned} \psi(\boldsymbol{x}) \longrightarrow & \exp\left[-a_1 \frac{\partial}{\partial x_1}\right] \psi(\boldsymbol{x}) \\ &= \exp\left[-ia_1\left(-i\frac{\partial}{\partial x_1}\right)\right] \psi(\boldsymbol{x}) \\ &= \exp\left[-ia_1 \hat{A}_1\right] \psi(\boldsymbol{x}) \end{aligned} \tag{8.4.39}$$

のように簡潔に書き直される. さらに

$$\hat{U}(a_1) \equiv \exp\left[-ia_1 \hat{A}_1\right] \tag{8.4.40}$$

とおけば $\hat{U}(a_1)$ はユニタリー演算子のはずであり, かつ

$$\hat{U}(a_1)\hat{U}(a_1') = \hat{U}(a_1 + a_1') \tag{8.4.41}$$

なることは明らかだから p. 437 でのべた Stone の定理により $\hat{A}_1$ は自己共役な演算子になっている. Stone の定理をいきなり使わないで $\hat{A}_1 = -i(\partial/\partial x_1)$ なる演算

子が Hilbert 空間で自己共役になっていることの直接的な証明は第 VI 部第 16 章で行われる．$\hat{p}_1 \equiv -i\hbar(\partial/\partial x_1)$ が運動量演算子と呼ばれるものであることはあらためていうまでもあるまい．運動量演算子の定義式に − 記号をつけたのは，座標系が $\boldsymbol{a}$ だけ平行移動することはすべての空間の点が $-\boldsymbol{a}$ だけ平行移動することと同等だからである．またこの群について $\hat{A}_j\,(j=1,2,3)$ は代数的に可換であるが，微分演算子としても

$$(\hat{p}_1\hat{p}_2-\hat{p}_2\hat{p}_1)\psi=0,\qquad (\hat{p}_2\hat{p}_3-\hat{p}_3\hat{p}_2)\psi=0,\qquad (\hat{p}_3\hat{p}_1-\hat{p}_1\hat{p}_3)\psi=0 \tag{8.4.42}$$

であることは直接検証することができる．

つぎに座標系を x_1 軸のまわりに微小回転する変換について同様なことを行ってみよう．a_1 を微小角とすれば

$$\psi(x_1,x_2,x_3)\longrightarrow\psi(x_1,x_2+a_1x_3+O(a_1{}^2),-a_1x_2+x_3+O(a_1{}^2))$$
$$=\left(1-a_1\left(x_2\frac{\partial}{\partial x_3}-x_3\frac{\partial}{\partial x_2}\right)+\cdots\right)\psi(x_1,x_2,x_3)$$

であるから

$$\hat{A}_1\equiv -i\left(x_2\frac{\partial}{\partial x_3}-x_3\frac{\partial}{\partial x_2}\right) \tag{8.4.43}$$

とおけば $\hat{A}_1$ は自己共役な演算子になっているはずである．同様にして x_2 軸のまわり，また x_3 軸のまわりのそれぞれの微小回転から

$$\hat{A}_2\equiv -i\left(x_3\frac{\partial}{\partial x_1}-x_1\frac{\partial}{\partial x_3}\right) \tag{8.4.44}$$

$$\hat{A}_3\equiv -i\left(x_1\frac{\partial}{\partial x_2}-x_2\frac{\partial}{\partial x_1}\right) \tag{8.4.45}$$

が導かれる．$\hat{A}_2, \hat{A}_3$ もまた自己共役な演算子のはずである．ただし上に定義した $\hat{A}_j\,(j=1,2,3)$ は運動量の場合と同じように空間の各点の回転による移動を生成する微小演算子となるようにしてあるから，座標系の回転に関する式(8.4.5)ではなく

$$[\hat{A}_1,\hat{A}_2]=i\hat{A}_3 \tag{8.4.46}$$

を満たすはずである((8.4.5)の $\hat{A}_j$ を $-\hat{A}_j$ でおきかえる)．

(8.4.43)の式の説明から以後何度も“はずである”という表現を使ったのは，微分を含むこれらの演算子の自己共役性を云々するためには，これらの演算子を

作用させて意味をもちうる Hilbert 空間のベクトル $\psi(x_1, x_2, x_3)$ の集合†を確定した上でかなり綿密に Hilbert 空間の要請との整合性を検証する作業が必要だからである．なお上記 $\{\hat{A}_j\}$ のそれぞれに $\hbar$ をかけたものを $\{\hat{L}_j\}$ と書き，**軌道角運動量演算子**(orbital angular momentum)と呼ぶことはすでに学んでいる通りである．

軌道角運動量演算子 $\hat{L}_j\,(j=1,2,3)$ が Hilbert 空間における自己共役な演算子，つまり観測量になっているかどうか，そしてその固有値，つまり測定値が $\hbar$ の整数倍になっているかの検証に進む前に，Lie 代数の有限次の正方行列による表現について説明しておこう．それは(8.4.26)の代数的関係を有限次の正方行列 $\rho(A_j)$ で表すことである．すなわち

$$[\rho(\hat{A}_1), \rho(\hat{A}_2)] = i\rho(\hat{A}_3), \qquad [\rho(\hat{A}_2), \rho(\hat{A}_3)] = i\rho(\hat{A}_1),$$
$$[\rho(\hat{A}_3), \rho(\hat{A}_1)] = i\rho(\hat{A}_2) \qquad (8.4.47)$$

なるような対応 $\hat{A}_j \to \rho(\hat{A}_j)$ を見つけることである．当然，背後に行列 $\rho(\hat{A}_j)$ の次数に等しい次元の複素ベクトル空間 V を想定している．ただしベクトルの成分は何であってもよい．また次元も前もっては決めておかないことにしよう．はなはだ漠然とした設定のように見えるが，空間 V の著しい抽象化の代償として，われわれになじみの深い有限次元の行列が駆使できる利点がある．実はこのベクトル空間が量子力学の表現する Hilbert 空間の部分空間になっていることが後でわかる．

まず

$$A_+ \equiv \rho(\hat{A}_1) + i\rho(\hat{A}_2), \qquad A_- \equiv \rho(\hat{A}_1) - i\rho(\hat{A}_2), \qquad H \equiv \rho(\hat{A}_3)$$

とおくと(8.4.46)から

$$[H, A_+] = A_+, \qquad [H, A_-] = -A_-, \qquad [A_+, A_-] = +2H \quad (8.4.48)$$

がえられる††．つぎに H を対角線化したときの対角線要素を求めるため，H の固有値方程式をつくる．

$$H\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda \qquad (8.4.49)$$

† これを $\hat{A}_j$ の定義域という．詳しくは本講座第4巻『量子力学II』第VI部第16章参照．

†† (8.4.48)の方程式は表現を用いて表されているが，もとの代数についても成立する．[•,•] を代数における積とみれば，(8.4.48)の第1，第2式は H の‘固有値方程式’になっている．(8.4.48)は Weyl の標準方程式ともいわれ，コンパクトな半単純 Lie 代数の構造を調べる上で非常に便利なものである．構造定数が H の‘固有値’になっているのに注目されたい(詳しくは [山内，杉浦] p. 119 を参照)．

われわれはまだ H について(8.4.48)の関係だけしか知らないから固有値 λ が実数であるということはできない．しかし有限次元の空間 V で考えているから，固有値および固有ベクトルの個数は有限である．このことを念頭において(8.4.48)から次の関係がえられることを確認しておこう．

$$HA_+\psi_\lambda = (\lambda+1)A_+\psi_\lambda, \qquad HA_-\psi_\lambda = (\lambda-1)A_-\psi_\lambda \tag{8.4.50}$$

こうして H の1つの固有ベクトルからつぎつぎに異なる H の固有ベクトルが作られることがわかったが，それらの係数はまだきまっていない．そこで H の固有値のうち実部が最大なものを l として

$$\psi_{l-1}{}^l \equiv A_-\psi_l{}^l, \qquad \psi_{l-2}{}^l \equiv A_-\psi_{l-1}{}^l \equiv A_-A_-\psi_l{}^l, \qquad \cdots \tag{8.4.51}$$

のように $\psi_m{}^l\,(m=l, l-1, \cdots)$ を定義しよう．$\psi_l{}^l\equiv\psi_l$ とすれば(8.4.50)より明らかに

$$H\psi_m{}^l = m\psi_m{}^l \tag{8.4.52}$$

かつ

$$HA_+\psi_m{}^l = (m+1)A_+\psi_m{}^l \tag{8.4.53}$$

である．それゆえ $A_+\psi_m{}^l$ は $\psi_{m+1}{}^l$ に比例しなければならない．その比例係数を計算すると

$$A_+\psi_m{}^l = (l-m)(l+m+1)\psi_{m+1}{}^l \tag{8.4.54}$$

となる．l の定義により $l+1$ なる H の固有値したがって固有ベクトル $\psi_{l+1}{}^l$ は存在しないが，(8.4.54)はたしかにそうなっている．(8.4.54)の導出あるいは帰納法による証明は読者にまかせる．ところで表現空間 V は有限次元としたから H の異なる固有関数の個数は V の次元 k に等しい．すなわち $\psi_l{}^l, \psi_{l-1}{}^l, \cdots, \psi_{l-(k-1)}{}^l$ がいずれも0でなく，かつ $\psi_{l-k}{}^l$ が0でなければならない．(8.4.54)で $m=l-k$ とおくと左辺は0また右辺で $\psi_{l-k+1}{}^l$ は0でないから

$$(l-(l-k))(l+(l-k)+1) = 0$$

すなわち

$$k(2l+1-k) = 0$$

でなければならない．k は自然数だから固有値 l は

$$l = \frac{1}{2}(k-1) \qquad (k=1, 2, 3, \cdots) \tag{8.4.55}$$

であることがわかった．H の固有値の数は V の次元数 $k=2l+1$ に等しいから，

最大の固有値を l とすれば H の固有値は

$$l, l-1, \cdots, -l+1, -l$$

で尽くされる．H の固有ベクトルを V の基底ベクトルにすれば H の行列要素はもちろん(8.4.49)および(8.4.50)から A_+, A_- の行列要素も直ちに書き下すことができる．しかし以上の議論では不必要な繁雑化を避けるために，規格化されていないベクトル $\psi_m{}^l$ を用いたから，これからの実用のために規格化された基底ベクトルで(8.4.54)を書き直しておこう．規格化とは上記 $\psi_m{}^l$ のそれぞれに正の実数をかけ，内積を1にすることである．そのようにした H の固有ベクトルを $\psi_m{}^{l\prime}$ としよう．そうすれば

$$A_+\psi_m{}^{l\prime} = a_m\psi_{m+1}{}^{l\prime} \tag{8.4.56}$$

$$A_-\psi_m{}^{l\prime} = b_m\psi_{m-1}{}^{l\prime} \tag{8.4.57}$$

と書かねばならない．$a_m \mp (l-m)(l+m+1)$ であるが，a_m が正の実数であることは明らかであろう．A_+ の Hermite 共役を †をつけて表すことにすれば，$A_+{}^\dagger = A_-$ $A_-{}^\dagger = A_+$ であるから

$$(A_+\psi_m{}^{l\prime}, A_+\psi_m{}^{l\prime}) = (\psi_m{}^{l\prime}, A_-A_+\psi_m{}^{l\prime}) = a_m b_{m+1}$$
$$(a_m\psi_{m+1}{}^{l\prime}, a_m\psi_{m+1}{}^{l\prime}) = (a_m)^2$$

したがって

$$a_m = b_{m+1} \tag{8.4.58}$$

また

$$A_+\psi_{m-1}{}^{l\prime} = \frac{1}{b_m}(A_-A_+ + 2H)\psi_m{}^{l\prime} = \frac{1}{b_m}(a_m b_{m+1} + 2m)\psi_m{}^{l\prime}$$

であるから

$$a_{m-1}b_m = a_m b_{m+1} + 2m \tag{8.4.59}$$

前の議論から $b_{-l}=0$ なることを考慮すれば(8.4.58)と(8.4.59)から

$$a_m{}^2 = b_{m+1}{}^2 = (l-m)(l+m+1)$$

がえられる．それゆえ

$$a_m = \sqrt{(l-m)(l+m+1)} \tag{8.4.60}$$

$$b_m = \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \tag{8.4.61}$$

となる．そこで規格化された $\psi_m{}^{l\prime}$ を基底ベクトルとする表示で H, A_+ および A_- を書くとつぎのようになる．

$$H=\begin{bmatrix} l & 0 & \cdots\cdots & 0 \\ 0 & l-1 & \cdots\cdots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ & & -l+1 & 0 \\ 0 & \cdots\cdots & 0 & -l \end{bmatrix}, \qquad A_+=\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{2l} & 0 & \cdots\cdots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2(2l-1)} & \cdots\cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ & & & 0 & \sqrt{2l} \\ 0 & \cdots\cdots & \cdots\cdots & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$A_-=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots & 0 \\ \sqrt{2l} & 0 & 0 & \cdots\cdots & \vdots \\ 0 & \sqrt{2(2l-1)} & 0 & \cdots\cdots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ & & & 0 & 0 \\ 0 & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \sqrt{2l} & 0 \end{bmatrix}$$

これから $\rho(\hat{A}_1), \rho(\hat{A}_2), \rho(\hat{A}_3)$ を書き下すことは容易である．その場合表現空間 V の次元数は l によってきまり $2l+1$ であるから，そのことを明示するためこれからは $\rho_l(\hat{A}_j)$, V^{2l+1} のように表すことにしよう．$l=0, \dfrac{1}{2}, 1$ について例示すると次のようになる．

l	V^{2l+1} の次元数	$\rho_l(\hat{A}_1)$	$\rho_l(\hat{A}_2)$	$\rho_l(\hat{A}_3)$
0	1	0	0	0
$\frac{1}{2}$	2	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
1	3	$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$

これらの表示から $\{\rho_{1/2}(\hat{A}_j)\}$, $\{\rho_1(\hat{A}_j)\}$ がそれぞれスピンと軌道角運動量に関係していることが予想されるが，物理的な意味をはっきりさせるためには表現空間 V^{2l+1} についてもう少し立ち入って調べる必要がある．それは節をあらためてすることにして，これまでの議論から直ちに導かれるもう 1 つの重要な関係式をあげておく．

$$((\rho_l(\hat{A}_1))^2+(\rho_l(\hat{A}_2))^2+(\rho_l(\hat{A}_3))^2)\psi_m{}^l = l(l+1)\psi_m{}^l \qquad (m=l, l-1, \cdots, -l) \tag{8.4.62}$$

証明は簡単であるから読者にまかせる．

これまでの説明では角運動量が離散的な固有値をもつという量子力学的な性質が‘量子条件’を用いず，回転群の代数から自然に出てきたかのように見える．量子力学の本質はどこに隠されているのか？　それはLie代数の表現にHilbert空間を使ったところにある．すなわち力学系の状態の記述にHilbert空間を使うという点に量子力学の本質が生きているのである．この点に関しては第VI部第16章であらためて論ずる．

§8.5　軌道角運動量とスピン

考えている力学系のハミルトニアンが空間の回転に対して不変ならば，回転群のLie代数が角運動量となり，それを表現するHilbert空間の次元数が良い量子数になることがわかった．しかしその結果として $\hbar/2$ という量子数をもつ角運動量の可能性が生じてきた．

一方，第4章で詳しく調べたように，質点の古典力学的角運動量に対応する軌動角運動量 $\{\hat{L}_j\}$ は $\hbar$ の整数倍の固有値しかとりえない．では $\hbar/2$ なる量子数をとる角運動量は何を意味し，その表現空間と軌道角運動量のそれとはどのような関係にあるか？

この問題を考えるために，もう一度軌道角運動量は本当に $\hbar$ の整数倍の固有値しかとれないのかどうか，物理学にとって不必要な強い数学的条件を外したできるだけ広い枠組で調べておこう．第1に力学系の状態をあらわすのに複素数値関数 $\psi(x,y,z)$ を用いる場合，その内積の定義で使われる積分はLebesgue積分とする．軌道角運動量は§4.2 b)にならって極座標を使って(ただし記法の簡単化のため $\hbar=1$ という単位系をとる)

$$\hat{L}_x = i\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{8.5.1}$$

$$\hat{L}_y = i\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{8.5.2}$$

$$\hat{L}_z = -i\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{8.5.3}$$

と表しておく．量子力学でわれわれが物理量として採用することができるのは前

に何度ものべたように自己共役な演算子である．自己共役性を確認するには，$\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ が作用する関数の範囲すなわち $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ の定義域をきめなければならない．

まず一番簡単な $\hat{L}_z$ についてそのような定義ができるかどうか調べてみよう．それは

$$\text{作　用：}(\hat{L}_z f)(\theta\varphi) = -\frac{i\partial f(\theta,\varphi)}{\partial\varphi} \tag{8.5.4}$$

$$\text{定義域：}\mathrm{D}^{(\delta)}(\hat{L}_z) = \Big\{ f(\theta,\varphi) : f(\theta,2\pi) = \exp(2i\delta\pi) f(\theta,0),\ \ \theta\in[0,2\pi],\ \text{で}$$

$$\varphi\text{について絶対連続},\ \frac{\partial f}{\partial\varphi}\in \mathrm{L}^2(0,2\pi)\Big\} \tag{8.5.5}$$

の可能性である．ここに δ は $[0,1)$ の中で勝手にとってよい実定数である．このように定義すれば $\delta\neq 0$ であっても $\hat{L}_z$ は自己共役な演算子になっている．その詳しい証明は第 VI 部 §16.3 b) でされるからここでは述べない．しかし物理的に考えてこのような定義域の設定は決して不自然ではない．境界条件が一見奇異に感じられるかもしれないが，f^*f にすれば位相因子は消滅するし，また $\varphi=0$ における微分が定義できなくともわれわれの演算には一向差支えない(測度 0 の点集合上では何が起ころうとかまわない！)．

つぎに $\hat{L}_x$ について，作用は (8.5.1) で与えられ，定義域 $\mathrm{D}^{(\delta)}(\hat{L}_x)$ は $\mathrm{D}^{(\delta)}(\hat{L}_z)$ と共通の境界条件

$$f(\theta,2\pi) = \exp(2i\delta\pi) f(\theta,0) \tag{8.5.6}$$

を含むものとし，自己共役性を調べてみる．すなわち $f, g\in\mathrm{D}^{(\delta)}(\hat{L}_x)$ について

$$(g, \hat{L}_x f) = (\hat{L}_x g, f) \tag{8.5.7}$$

がつねに成り立つかどうか検算する．簡単な部分積分により

$$(g, \hat{L}_x f) = (\hat{L}_x g, f) + i\int_0^{\pi} \cos\theta [fg^* \cos\varphi]_0^{2\pi} d\theta \tag{8.5.8}$$

がえられるが，$f(\theta,\varphi)$ も $g(\theta,\varphi)$ も条件 (8.5.4) を満たすから上式の右辺の第2項は消える．同様にして $\hat{L}_y$ が自己共役になるように $\mathrm{D}^{(\delta)}(\hat{L}_y)$ を定義することができる．

それゆえ $\mathrm{D}=\mathrm{D}^{(\delta)}(\hat{L}_x)\cap\mathrm{D}^{(\delta)}(\hat{L}_y)\cap\mathrm{D}^{(\delta)}(\hat{L}_z)$ をあらためて定義域とすれば $\delta\neq 0$ であっても D は稠密であってかつ $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ がいずれも自己共役になる．稠密と

いう意味は後で(第 VI 部第 16 章)で詳しく説明されるが，ここでは $f\in \mathrm{D}$ が $\hat{L}_z$ の固有関数で展開できるものと理解して差支えない．$\hat{L}_z$ の固有値 μ および固有関数 $f_\mu{}^\lambda(\theta,\varphi)$ は直ちに求められる．

$$-i\frac{\partial}{\partial\varphi}f_\mu{}^\lambda(\theta,\varphi)=\mu f_\mu{}^\lambda(\theta,\varphi) \tag{8.5.9}$$

$$f_\mu{}^\lambda(\theta,\varphi)=(2\pi)^{-1/2}\exp{(i\mu\varphi)}\Theta_\mu{}^\lambda(\theta) \tag{8.5.10}$$

ただし $\Theta_\mu{}^\lambda(\theta)$ は

$$\int_0^\pi \Theta_\mu{}^{\lambda *}(\theta)\Theta_\mu{}^\lambda(\theta)\sin\theta\, d\theta=1 \tag{8.5.11}$$

と規格化する．境界条件(8.5.4)から $\mu=\delta+m$ $(m=0, \pm1, \pm2, \cdots)$ がえられる．それゆえ $\delta=1/2$ とすれば $\hat{L}_z$ は半整数の固有値をもつことになる！

量子力学における物理量は自己共役な線形演算子である，という要請だけを満たせばよいのであれば，上のようにして定義された軌道角運動量演算子は半整数の固有値をもちうる．しかしまた $[0,1)$ の間の任意の値をとりうる δ にとくに 1/2 を付与する根拠もない．実は $\delta\neq0$ ならばつぎのようないくつかの困ったことがでてくるのである．

(1) $\hat{L}_x, \hat{L}_y$ の固有値を δ の値に無関係に整数にすることができる．それゆえ $\delta\neq0$ ならば $\hat{L}_x$ や $\hat{L}_y$ をユニタリー変換で $\hat{L}_z$ に移すことができない．

(2)
$$\boldsymbol{L}^2 f=\hat{L}_x{}^2 f+\hat{L}_y{}^2 f+\hat{L}_z{}^2 f,\qquad f\in \mathrm{D}(\boldsymbol{L}^2)\subset \mathrm{D} \tag{8.5.12}$$

なる定義域が作れない．

(3)
$$\hat{L}_x\hat{L}_y f-\hat{L}_y\hat{L}_x f=i\hat{L}_z f,\qquad f\in \mathrm{D}(\boldsymbol{L}^2)\subset \mathrm{D} \tag{8.5.13}$$

なる定義域が作れない．

もし $\delta=0$ ならば(1), (2), (3)の難点はすべて消滅し，肯定的に解決する．この証明には第 VI 部第 16 章の知識が必要であるから，ここでは割愛する([Winter] 参照)．

とにかくこうして軌道角運動量が整数の固有値をもつことが判明した．この場合固有関数 $\psi_m{}^l(x,y,z)$ は球関数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ となることは§4.2 で詳しく述べられている通りである．では半整数の固有値は量子力学ではあらわれないか？

前章から読み進んできた読者は直ちに相対論を頭に浮べ，3 次元 Euclid 空間の回転群の代りに 4 次元 Minkowski 空間の Lorentz 変換，より正確には固有

Lorentz 変換を用いれば，半整数の固有値をもつ角運動量が出てくる，と思うかもしれない．そして連続群 $SL(2, \mathbb{C})$ によって固有 Lorentz 変換群を表現したことを想起するであろう．では Lorentz 群を用いないで，すなわち非相対論的な量子力学では半整数の固有値をもつ角運動量は導くことができないか？　つぎにこの問題を考えてみよう．

力学系の状態を 1 つの複素数値関数 $\psi(x, y, z)$ で表し，3 次元 Euclid 空間の回転群 $SO(3)$ の Lie 代数を ψ に対する微分をふくむ演算子として表現したものが軌道角運動量であるから，その一番簡単な拡張として，力学系の状態が 2 つの複素数値関数 $\psi(x, y, z), \varphi(x, y, z)$ の組で表されるものとして，これまでの議論と同じようなことを行ってみよう．空間の 1 点 (x, y, z) に 2 つ以上の値を対応させるのは物理学で別に不自然なことではない．たとえば古典電磁気論における静電場は 1 点 (x, y, z) に 3 個の実数値関数 $E_x(x, y, z)$, $E_y(x, y, z)$, $E_z(x, y, z)$ の組を対応させたものである．

できるだけ自然な拡張を目ざすから ψ, φ はそれぞれこれまで通りのものとする．すなわち $\psi, \varphi \in \mathsf{H}$．そして空間の座標系 Σ の回転 R によって

$$\begin{bmatrix}\psi(\boldsymbol{x})\\ \varphi(\boldsymbol{x})\end{bmatrix} \xrightarrow{R} \begin{bmatrix}\psi'(\boldsymbol{x}')\\ \varphi'(\boldsymbol{x}')\end{bmatrix} = U(R)\begin{bmatrix}\psi(R^{-1}\boldsymbol{x})\\ \varphi(R^{-1}\boldsymbol{x})\end{bmatrix} \tag{8.5.14}$$

と変換されるものとしよう．$U(R)$ は R によってきまる 2 行 2 列の複素行列である．前に詳しく調べたように R は 3 個のパラメーターをもつ Lie 群 $SO(3)$ の元の表現であるから $U(R)$ も 3 個のパラメーターをもつ何かある Lie 群の元になっていなければならない．幸いなことに

$$\bar{\psi}'\psi' + \bar{\varphi}'\varphi' = \bar{\psi}\psi + \bar{\varphi}\varphi \tag{8.5.15}$$

を満たす 2 行 2 列の複素行列のうち行列式が 1 になる特殊なものを選べば，それらのすべては 3 個のパラメーターをもつ Lie 群になっている．この群のことを $\boldsymbol{SU(2)}$ (special unitary group) と呼ぶ．実際，$SU(2)$ のうち単位元の近くのもの，すなわち恒等変換からわずかにずれたものは，§8.4 で行ったのと同様にして

$$\begin{bmatrix}1+i\varepsilon_3 & \varepsilon_2+i\varepsilon_1\\ -\varepsilon_2+i\varepsilon_1 & 1-i\varepsilon_3\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} + i\varepsilon_1\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix} + i\varepsilon_2\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix} + i\varepsilon_3\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix} \tag{8.5.16}$$

となる．そこで Pauli 行列

$$\sigma_1=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\quad \sigma_2=\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix},\quad \sigma_3=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix} \qquad (8.5.17)$$

を用いてこの Lie 代数の構造を求めると直ちに

$$[\sigma_1, \sigma_2]=2i\sigma_3,\quad [\sigma_2, \sigma_3]=2i\sigma_1,\quad [\sigma_3, \sigma_1]=2i\sigma_2 \qquad (8.5.18)$$

がえられる．さらに $\hat{s}_1=\sigma_1/2$, $\hat{s}_2=\sigma_2/2$, $\hat{s}_3=\sigma_3/2$ とおくならば，$\{\hat{s}_j\}$ は (8.4.27) と全く同じ交換関係を満たすことがわかる．これは，2 つの Lie 群 $SO(3)$ と $SU(2)$ の局所的な構造，すなわち Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ と $\mathfrak{su}(2)$ が全く一致することを示すものである．これを**局所同型**(locally isomorphic)という．$\hat{s}_3$ の固有値は 1/2, −1/2 であるから，われわれは 2 次元の空間で角運動量を表現したことになる．

たしかにわれわれは Lorentz 変換を媒介しないで，直接 3 次元 Euclid 空間の回転群を‘量子力学的に扱う’ことによりスピン 1/2 の粒子像を導くことができた．ではここで導入した 2 成分の複素ベクトル(ψ, φ)は §7.2 で定義されたスピノル(ξ_1, ξ_2)と同じものなのかどうか？　この問に答えるためには $SU(2)$ と $SL(2, \mathbf{C})$ の構造を比較するのがよい．本節で $SU(2)$ を導入した動機は，これが回転群 $SO(3)$ と同じ数すなわち 3 個の実パラメーターをもつことであった．これに対し $SL(2, \mathbf{C})$ は $2\times4-2=6$ 個の実パラメーターをもっている．これは固有 Lorentz 群がもつ実パラメーターの数と一致する．しかし $SL(2, \mathbf{C})$ はそれら 6 個の実パラメーターをばらばらの形でもっているのではなく，定義そのものから明らかなように 3 個の複素数として含んでいる．それゆえ $SL(2, \mathbf{C})$ は複素 Lie 群になっているということができる．

ところで，角運動量のような物理量を問題にする場合，重要なのは Lie 群そのものではなくそれから導かれる Lie 代数であることは，これまで何度も述べてきた通りである．では 2 つの Lie 代数 $\mathfrak{su}(2)$ と $\mathfrak{sl}(2, \mathbf{C})$ の関係はどうか．前者が実数体上の Lie 代数，後者が複素数体上の Lie 代数であることはいうまでもないが，$\mathfrak{sl}(2, \mathbf{C})$ の任意の元 Z は一意的に $\mathfrak{su}(2)$ の 2 つの元 X, Y を用いて

$$Z=X+iY$$

と表すことができる．証明は読者にまかせよう．こうして $\mathfrak{sl}(2, \mathbf{C})$ の表現の同値性や既約分解の条件は $\mathfrak{su}(2)$ のそれらと全く同じになることが予想される．そし

て実際証明できる([山内，杉浦] p. 153 参照).

さて R を座標系 Σ の微小回転とし，$U(R)$ と共通のパラメーターで(8.5.14)をあらわすことにしよう．(8.4.23), (8.4.24) および (8.4.25) で定義した $\hat{A}_j$ $(j=1,2,3)$ を用いると $\varepsilon_j \ll 1$ としたから

$$\begin{bmatrix} \psi'(\boldsymbol{x}') \\ \varphi'(\boldsymbol{x}') \end{bmatrix} = \left(1+i\sum_{j=1}^{3}\varepsilon_j\hat{s}_j\right)\begin{bmatrix} \left(1-i\sum_{j=1}^{3}\varepsilon_j\hat{A}_j\right)\psi(\boldsymbol{x}) \\ \left(1-i\sum_{j=1}^{3}\varepsilon_j\hat{A}_j\right)\varphi(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix}$$

$$= \left(1+i\sum_{j=1}^{3}\varepsilon_j(\hat{s}_j+\hat{L}_j)\right)\begin{bmatrix} \psi(\boldsymbol{x}) \\ \varphi(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix} \qquad (8.5.19)$$

となる．ただし $-\hat{A}_j=\hat{L}_j$ と直してある(p. 591 の注意参照)．(8.5.19)は 1 個の粒子の全角運動量が

$$\hat{J}_j = \hat{s}_j+\hat{L}_j \qquad (j=1,2,3) \qquad (8.5.20)$$

で与えられることを示唆するが，$\hat{s}_j$ は 2 行 2 列の行列で $\hat{L}_j$ は微分を含む 1 個の演算であるから，このままではわかりにくい．軌道角運動量が最大の固有値 l をもつ場合，ψ, φ とも $(2l+1)$ 個の固有関数 $\psi_m{}^l(\boldsymbol{x})$ で展開できる．すなわち

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \sum_{m=-l}^{l}\lambda_m\psi_m{}^l(\boldsymbol{x}), \qquad \varphi(\boldsymbol{x}) = \sum_{m=-l}^{l}\mu_m\psi_m{}^l(\boldsymbol{x}) \qquad (8.5.21)$$

それゆえ ψ, φ はそれぞれ V^{2l+1} のベクトル $(\lambda_l, \lambda_{l-1}, \cdots, -\lambda_l)$, $(\mu_l, \mu_{l-1}, \cdots, -\mu_l)$ で完全に表される．一方この空間 V^{2l+1} における $\hat{L}_j$ の表現 $\rho_l(\hat{L}_j)$ は $(2l+1)$ 次の正方行列である．そこで

$$\hat{s}_j = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} \\ s_{21} & s_{22} \end{bmatrix} \qquad (8.5.22)$$

としてつぎの $2(2l+1)$ の正方行列をつくる．

$$\begin{bmatrix} s_{11}\rho_l(\hat{L}_j) & s_{12}\rho_l(\hat{L}_j) \\ s_{21}\rho_l(\hat{L}_j) & s_{22}\rho_l(\hat{L}_j) \end{bmatrix} \qquad (8.5.23)$$

これは $\hat{s}_j$ と ρ_l の **Kronecker 積**または**テンソル積**と呼ばれるもので，ふつう $\hat{s}_j \otimes \rho_l$ と書かれる．この表式を使うと $\hat{L}_j$ の表現として $\rho_l(\hat{L}_j)$ なる行列をとった場合

$$(\hat{s}_j+\hat{L}_j)\begin{bmatrix}\psi\\ \varphi\end{bmatrix}=\hat{s}_j\otimes\rho_l(\hat{L}_j)\begin{bmatrix}\lambda_l\\ \lambda_{l-1}\\ \vdots\\ \lambda_{-l}\\ \mu_l\\ \mu_{l-1}\\ \vdots\\ \mu_{-l}\end{bmatrix}\qquad(8.5.24)$$

になることは容易にたしかめられるだろう.

以上の考察から，力学系の状態が2個の複素数値関数 ψ, φ の組で表される場合，系のハミルトニアンが空間の回転に対し不変ならば，$\hat{J}_j=\hat{s}_j+\hat{L}_j\,(j=1,2,3)$ が保存量になっていることがわかる．特に軌道角運動量が0の場合，すなわち $l=0$ の場合は(8.5.24)において

$$\hat{s}_j\otimes\rho_0(\hat{L}_j)=\hat{s}_j\qquad(8.5.25)$$

であり，$\hat{J}_3=\hat{s}_3$ は1/2, −1/2の固有値をもつ．これは古典物理学における自転に対応するものであり，スピンと呼ばれる．

もともと量子力学における軌道角運動量の固有状態は原子スペクトルの説明のため原子内部の電子の運動状態を記述するために導入されたものである．しかもそれは単に状態の分類だけでなく，光の放出，吸収をきめる状態間の遷移における規則性を理論的に説明することができた．これについては§8.6で論ぜられている通りであるが，原子スペクトルの実験的研究が進むに従って軌道角運動量の量子数だけでは電子の状態を記述するのに不十分で，軌道角運動量の各固有状態をさらに2つの固有状態にわける必要を生じた．1925年 G. E. Uhlenbeck と S. A. Goudsmit は電子が自転によって2つの固有状態をもつという模型でこれを説明したが，拡がりをもたない点の自転を定式化することは困難であった．この困難は1927年 W. Pauli によって，本節でのべたような回転群の Lie 代数の最小の既約表現として，非相対論的に解決された．しかしこれで電子のスピンが物理的に解明されたわけではない．電子の磁気能率や Thomas 因子を理解するには§7.6で示されているように P. A. M. Dirac による電子の相対論的取扱いまで待たねばならなかった(1928年)．これは4個の複素数値関数で電子の状態を表

そうとするものであるから，回転群の Lie 代数の表示としては既約ではない．にもかかわらずこれが必要なのは電子の状態を記述するためにはスピン以外にエネルギーの正負の状態を指定しなければならないからである．

では3個の複素数値関数 ψ, φ, χ の組で状態を表すことにしたらどうか？　この場合すぐ思いつくのは実数値 $\bar{\psi}\psi+\bar{\varphi}\varphi+\bar{\chi}\chi$ を不変にする1次変換のうち行列式が1に等しい特殊なもののすべての集り $SU(3)$ を変換群とすることであろう．この群はコンパクトな半単純 Lie 群になっているから，前節および本節で述べた $SU(2)$ の扱いがほとんどそのまま使え，その Lie 代数の構造およびそのベクトル表現も同様にして求めることができる．ただしこの群は8個のパラメーターをもち，回転群 $SO(3)$ と直接関連させることができない．しかし $SU(3)$ の Lie 代数 $\mathfrak{su}(3)$ はお互いに交換可能な2個の元を含むから，それぞれの固有値をスピン以外の‘素粒子の量子数’であるアイソスピンおよびハイパーチャージに対応させる模型として用いることができる(本講座第10巻『素粒子論』第8章参照．そこには $\gamma\mathfrak{u}(3)$ の代数およびいくつかの次元における表現が具体的に与えられている)．

以上の説明でわかるように決定的ともいえる重要な性質は2つの Lie 群 $SO(3)$ と $SU(2)$ のそれぞれの Lie 代数が完全に一致することである．すなわちもとの2つの群の局所的な性質が同じになっている点である．非相対論的な量子力学の枠組の中で軌道角運動量とスピンの関係を理解するにはこれで十分である．しかし読者は当然 $SO(3)$ と $SU(2)$ の大域的な性質の違いにも興味をもたれるだろう．これは単に数学的な興味だけではなく，スピンが空間座標系の有限回転にさいしてどのように変換されるか，という技術的問題にも関連しているから，本節の最後にこの問題に触れておく．

話はまことに簡単である．

$$H=\left\{\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\right\} \tag{8.5.26}$$

とおけば H が $SU(2)$ の不変部分群になっていることは自明であろう．それゆえ $SU(2)$ の H を法とする剰余群 $SU(2)/H$ をつくることができる(不変部分群や剰余群の定義は§8.1にしてある)．そうすれば

$$SO(3)\cong SU(2)/H \tag{8.5.27}$$

であることを次のようにして証明することができる．ここに $\cong$ は群の同型関係を示す記号である．上の関係は $SO(3)$ の任意の 1 つの元に $SU(2)$ の 2 つの元が対応していることにあたる．

まず $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{z}$ を次のように定義する．

$$\boldsymbol{x} \equiv \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}, \quad x_1, x_2, x_3 \in \mathrm{R}; \qquad \boldsymbol{z} \equiv \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix}, \quad |z_1|^2+|z_2|^2 = 1, \quad z_1, z_2 \in \mathrm{C} \tag{8.5.28}$$

つぎに $\boldsymbol{Z}$ と $\boldsymbol{x}$ を(8.5.17)の Pauli 行列を使って

$$\boldsymbol{Z} \longmapsto \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} (\bar{\boldsymbol{Z}}, \sigma_1 \boldsymbol{Z}) \\ (\bar{\boldsymbol{Z}}, \sigma_2 \boldsymbol{Z}) \\ (\bar{\boldsymbol{Z}}, \sigma_3 \boldsymbol{Z}) \end{bmatrix} \tag{8.5.29}$$

のように対応づける．$T \in SU(2)$ としたとき

$$\boldsymbol{Z} \longrightarrow \boldsymbol{Z}' = T\boldsymbol{Z} \tag{8.5.30}$$

によって

$$\boldsymbol{x} \longrightarrow \boldsymbol{x}' = \begin{bmatrix} (\bar{\boldsymbol{Z}}', \sigma_1 \boldsymbol{Z}') \\ (\bar{\boldsymbol{Z}}', \sigma_2 \boldsymbol{Z}') \\ (\bar{\boldsymbol{Z}}', \sigma_3 \boldsymbol{Z}') \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\bar{\boldsymbol{Z}}, T^\dagger \sigma_1 T\boldsymbol{Z}) \\ (\bar{\boldsymbol{Z}}, T^\dagger \sigma_2 T\boldsymbol{Z}) \\ (\bar{\boldsymbol{Z}}, T^\dagger \sigma_3 T\boldsymbol{Z}) \end{bmatrix} \tag{8.5.31}$$

なる変換がどんな形になっているか調べればよいのであるが，まず簡単のため T として σ_3 で生成される

$$T = \exp(i\theta\sigma_3) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^n}{n!} \sigma_3{}^n = \cos\theta + i(\sin\theta)\sigma_3 \tag{8.5.32}$$

をとってみよう．(8.5.30)における $T^\dagger$ は T の Hermite 共役である．(8.5.31)の最後の式を出すのには $\sigma_3{}^2=1$ が使われている．Pauli 行列の性質を使って簡単な計算を行うと

$$\boldsymbol{x}' = \begin{bmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta & 0 \\ -\sin 2\theta & \cos 2\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \boldsymbol{x} \tag{8.5.33}$$

がえられる．これは座標系を x_3 軸のまわりに -2θ 回転する変換になっている．このことから x_3 軸のまわりに θ だけ回転する変換は

$$T = \exp\left(-i\frac{\theta}{2}\sigma_3\right) \tag{8.5.34}$$

で与えられることがわかる．しかしこれだけではない．

$$-T = -\exp\left(-i\frac{\theta}{2}\sigma_3\right) \in SU(2) \tag{8.5.35}$$

によっても全く同じ x_3 軸のまわりの回転がえられる．同様にして x_1, x_2 軸のまわりの角 θ の回転はそれぞれ $SU(2)$ の

$$\pm\exp\left(-i\frac{\theta}{2}\sigma_1\right), \qquad \pm\exp\left(-i\frac{\theta}{2}\sigma_2\right)$$

で与えられることがわかる．

§8.6　角運動量の合成と分解

回転群の Lie 代数のベクトル表現として量子力学的な角運動量がえられることは §8.4 で明らかにされたが，実用上には角運動量の合成や分解の定式化が必要である．その説明に入る前に，一般的な Lie 代数 $\mathfrak{G}$ の表現について同値性および既約性の定義とその物理的意味をのべておこう．いま $\mathfrak{G}$ の任意の元 $\hat{A}$ に異なる n 次の正方行列 ρ, ρ' を対応させたとする．もし行列式が 0 でない n 次の一定の行列 P が存在して

$$\rho'(\hat{A}) = P\rho(\hat{A})P^{-1}, \qquad \forall\hat{A} \in \mathfrak{G} \tag{8.6.1}$$

ならば ρ と ρ' は**同値**(equivalent)であるという．表現空間が Hilbert 空間で P がユニタリー行列のとき**ユニタリー同値**という．これは表現空間 V の基底ベクトルのとり方に依存しない性質だけが物理的に意味をもつということを定式化したものである．つぎに V の部分空間を U とした場合，もし $\rho(\hat{A})U \subset U$, $\forall\hat{A} \in \mathfrak{G}$ ならば U を**不変部分空間**(invariant subspace)という．そして，もし ρ が $U=0$ あるいは $U=V$ 以外の不変部分空間をもたないならば，表現(ρ, V)は**既約**(irreducible)であるという．

われわれが回転群の Lie 代数についてこれまで求めた表現(ρ_l, V^{2l+1})はすべて既約である．その証明は簡単である．この空間 V^{2l+1} は $\rho_l(\hat{A}_3)$ の $(2l+1)$ 個の固有ベクトル $\{\psi_m{}^l, (m=l, l-1, \cdots, -l)\}$ で張られている．したがって V^{2l+1} の部分空間 U(もちろん 0 あるいは V^{2l+1} を除く)は少なくともどれか 1 つの固有ベクト

ル $\psi_{m'}{}^{l}$ を含まない．そこでもし $\psi_{m'}{}^{l}$ だけが含まれていないとすれば $\psi_{m'+1}{}^{l}$ または $\psi_{m'-1}{}^{l}$ がその部分空間 U に含まれている．そうすれば $A_{-}U$ あるいは $A_{+}U$ によって $\psi_{m'}{}^{l}$ が生じ U は不変部分空間ではないことがわかる．2個以上の固有ベクトルが U に含まれていない場合も同様にして U が不変部分空間ではないことを示すことができる．

つぎに2つの表現 (ρ_l, V^{2l+1}) と $(\rho_{l'}, V^{2l'+1})$ の合成を考える．V^{2l+1} と $V^{2l'+1}$ はそれぞれ $\{\psi_m{}^l, (m=l, l-1, \cdots, -l)\}$，$\{\psi_{m'}{}^{l'}, (m'=l', l'-1, \cdots, -l')\}$ で張られているから，それぞれから1つずつとった固有ベクトルの積をつくり，そのすべて $\{\psi_m{}^l\psi_{m'}{}^{l'}\}$ で張られる空間 V を考えると，その次元は明らかに $(2l+1)(2l'+1)$ である．この空間において $\psi_m{}^l\psi_{m'}{}^{l'}$ が角運動量の第3成分 $\hat{A}_3=H$ の固有ベクトルになっていることは，軌道角運動量の場合 H が微分演算子であることから

$$H(\psi_m{}^l\psi_{m'}{}^{l'}) = (H\psi_m{}^l)\psi_{m'}{}^{l'} + \psi_m{}^l(H\psi_{m'}{}^{l'})$$
$$= (m+m')\psi_m{}^l\psi_{m'}{}^{l'} \tag{8.6.2}$$

なる関係を見れば明らかである．スピンの場合は H を微分演算子で表せないから前節で述べたように V における $(2l+1)(2l'+1)$ 個の成分をもつベクトルに作用させなければならない．(8.5.23)の表し方をみれば軌道角運動量演算子を行列で表現しても(8.6.2)が成り立つことは容易にわかる．$\psi_m{}^l$, $\psi_{m'}{}^{l'}$ はそれぞれ基底ベクトルであって，ベクトル成分ではないから混同しないように！

ところで(8.6.2)における m, m' はそれぞれ $(l, l-1, \cdots, -l+1, -l)$, $(l', l'-1, \cdots, -l'+1, -l')$ の値をとりうるから

$$M = m+m' \tag{8.6.3}$$

は $(2l+1)(2l'+1)$ 個の組合せをとりうる．しかし，それらの値がすべて異なるわけではむろんない．実際，$(m=l,\ m'=l'-1)$ でも，$(m=l-1,\ m'=l')$ でも，$M=l+l'-1$ になる．そこで V における H の固有値 M のすべてをつぎのように並べてみる．まず $l\geqq l'$ とする．

$$\begin{array}{c} l+l',\ l+l'-1,\ \cdots\cdots\cdots\cdots,\ -l-l'+1,\ -l-l' \\ l+l'-1,\ \cdots\cdots\cdots\cdots,\ -l-l'+1 \\ \ddots \qquad\qquad \iddots \\ l-l,\ \cdots,\ -l+l' \end{array}$$

各行の個数は $2(l+l')+1$, $2(l+l'-1)+1$, $\cdots$, $2(l-l')+1$ で，これを合計すれ

ば，たしかに $(2l+1)(2l'+1)$ になっている．各行は H の最大の固有値をそれぞれ $l+l', l+l'-1, \cdots, l-l'$ としたときのすべての固有値を並べたものになっている．すなわち既約表現 $\rho_{l+l'}, \rho_{l+l'-1}, \cdots, \rho_{l-l'}$ のそれぞれにおける H の固有値を尽くしている．それゆえ V 空間でこの並びかえに相当するユニタリー変換を行えば，V は Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ に関してつぎのようないくつかの不変部分空間に分解されるはずである．

$$V^{2(l+l')+1},\quad V^{2(l+l'-1)+1},\quad \cdots,\quad V^{2(l-l')+1}$$

そのようなユニタリー変換の行列要素についてはすぐ後で説明する．この分解に対応して V での $\hat{A}_j$ の行列表現 $\rho(\hat{A}_j)$ はすべて図 8.2 のように $(2l+1)(2l'+1)$ より小さい次数の正方行列を対角線的に並べたものになる．$l<l'$ の場合も同様で最後の空間が $V^{(l'-l)+1}$ になるだけである．そこで一般的に上にのべたことを記号的に

$$\rho_l\otimes\rho_{l'} = \rho_{l+l'}\oplus\rho_{l+l'-1}\oplus\cdots\oplus\rho_{|l-l'|} \tag{8.6.4}$$

のように表す．$\otimes$は前節で説明した Kronecker 積(*8.5.23*)を一般化したもので，ρ_l の行列要素を a_{ij} としたとき

$$\rho_l\otimes\rho_{l'} = \begin{bmatrix} a_{11}\rho_{l'} & a_{12}\rho_{l'} & \cdots & a_{1,2l+1}\rho_{l'} \\ a_{21}\rho_{l'} & a_{22}\rho_{l'} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ a_{2l+1,1}\rho_{l'} & \cdots\cdots & & a_{2l+1,2l+1}\rho_{l'} \end{bmatrix} \tag{8.6.5}$$

で与えられる．$\oplus$は**直和**(direct sum)と呼ばれる．

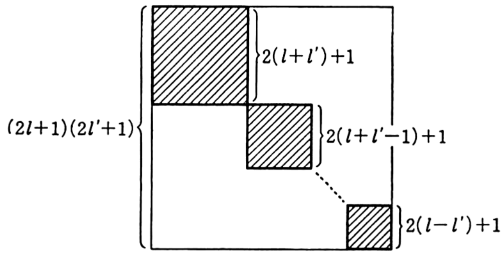


図 8.2 直積の既約分解 ($l>l'$)．斜線部分以外は恒等的に零．

各部分空間における $\hat{A}_1{}^2+\hat{A}_2{}^2+\hat{A}_3{}^2$ の固有値が，それぞれ $(l+l')(l+l'+1)$，$(l+l'-1)(l+l')$，$\cdots$，$|l-l'|(|l-l'|+1)$ になることはいうまでもないだろう．つぎ

にいくつかの実用上しばしば現れる例をあげておく．(　)内の数字は表現空間の次元数を表す．

(i)
$$\rho_{1/2}\otimes\rho_l=\rho_{l+1/2}\oplus\rho_{l-1/2} \quad (8.6.6)$$
$$(2(2l+1))\quad(2l+2)\quad(2l)$$

この左辺の意味は前節の終りで説明した．

(ii)
$$\rho_{1/2}\otimes\rho_{1/2}=\rho_1\oplus\rho_0 \quad (8.6.7)$$
$$(4)\qquad(3)\quad(1)$$

これはスピン 1/2 の粒子を 2 個合成すると 3 重項状態(triplet state)と 1 重項状態(singlet state)があらわれることを示す．

(iii)
$$\rho_1\otimes\rho_1=\rho_2\oplus\rho_1\oplus\rho_0 \quad (8.6.8)$$
$$(9)\qquad(5)\quad(3)\quad(1)$$

(iv)
$$\rho_0\otimes\rho_l=\rho_l \quad (8.6.9)$$
$$(2l+1)\quad(2l+1)$$

上の例でとくに興味があるのは(ii)の $\rho_{1/2}\otimes\rho_{1/2}$ の既約分解である．具体的に右辺の ρ_1 と ρ_0 の固有ベクトルを構成してみるとそれぞれ

$$\rho_1:\ \psi_{1/2}{}^{1/2}\psi'_{1/2}{}^{1/2},\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1/2}{}^{1/2}\psi'_{-1/2}{}^{1/2}+\psi_{-1/2}{}^{1/2}\psi'_{1/2}{}^{1/2}),\quad \psi_{-1/2}{}^{1/2}\psi'_{-1/2}{}^{1/2}$$

$$\rho_0:\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1/2}{}^{1/2}\psi'_{-1/2}{}^{1/2}-\psi_{-1/2}{}^{1/2}\psi'_{1/2}{}^{1/2})$$

となることは 3 重項状態，1 重項状態を知っている読者にとってほとんど自明であろう．そこで簡単のため $u_1\equiv\psi_{1/2}{}^{1/2}$，$v_1\equiv\psi_{-1/2}{}^{1/2}$，$u_2=\psi'_{1/2}{}^{1/2}$，$v_2=\psi'_{-1/2}{}^{1/2}$ とおくと

$$\psi_1{}^1=u_1u_2,\quad \psi_0{}^1=\frac{1}{\sqrt{2}}(u_1v_2+u_2v_1),\quad \psi_{-1}{}^1=v_1v_2$$

$$\psi_0{}^0=\frac{1}{\sqrt{2}}(u_1v_2-u_2v_1)$$

であるから $\psi_m{}^1, \psi_m{}^0$ がそれぞれ u_1, v_1, u_2, v_2 の双 1 次形式(bilinear form)で表されることがわかる．しかも面白いことに，$\psi_m{}^1$ は添字 1, 2 について対称式，$\psi_m{}^0$ は反対称式になっている．このような多項式を作るには 1903 年 A. Young が‘発明’したつぎの方法を用いると便利である．それはこの場合，正方形の箱を 2 個ならべる方法はいくつあるかを図形で調べる方法である．明らかにそれは □□ と

$\genfrac{}{}{0pt}{}{\square}{\square}$ の2通りである．1つの箱には u_1 か v_1 を，他の箱には u_2 か v_2 をいれる．$\square\square$ には添字1と2に関して対称，$\genfrac{}{}{0pt}{}{\square}{\square}$ には反対称になるようにして多項式をつくる．そのさい規格化しておくと $\square\square$ からは $\psi_1{}^1, \psi_0{}^1, \psi_{-1}{}^1$ がえられ，$\genfrac{}{}{0pt}{}{\square}{\square}$ からは $\psi_0{}^0$ がえられる．これを図式的に

$$\square\times\square=\square\square+\genfrac{}{}{0pt}{}{\square}{\square} \tag{8.6.10}$$

と表す．このような図形を **Young の図形**(Young's diagram)と呼んでいる．このようにして $\psi_m{}^1$ が u, v の多項式で表されたが同様なことを繰り返して $\psi_m{}^{3/2}$, $\psi_m{}^1$, … も順々に u, v の斉次式で表せることも容易に推察されるであろう．もちろん次数は3, 4と上ってゆく．

ここでこれまで説明してきた角運動量の既約分解の物理的な意味を考えてみよう．それにはまず系の全角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}}\equiv(\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$ の2つの固有値 j と m についてそれらの量と観測との関係を考えねばならない．われわれはこれまで説明の便宜上 $\hat{J}_z$ の固有値 m を求め，その最大値を J とした．そして $\hat{\boldsymbol{J}}^2\equiv\hat{J}_x{}^2+\hat{J}_y{}^2+\hat{J}_z{}^2$ の固有値が $j(j+1)$ で与えられることを知った．だが，考えている物理系が空間的に対称ならば，空間の座標系は任意の向きに選んで差支えないから，とくに $\hat{J}_z$ を対角化する必然性はない．$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ は $\hat{J}_z$ だけではなく $\hat{J}_x, \hat{J}_y$ とも可換であるから J_x あるいは $\hat{J}_y$ を対角化してもよく，それらの場合も $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ は同じ固有値をもつ．それゆえ $\hat{J}_z$ の固有値 m をもって角運動量の z 成分とすることに特別な物理的な意味はない．この場合，系の角運動量の状態は j だけで指定されて，その状態が $(2j+1)$ 重に縮退していると考えられる．この縮退がとけるのは，その物理系に非等方的な何らかの影響が及ぼされたときである．たとえば磁場あるいは電場が加えられれば，その方向を空間の z 軸に選ぶことによって異なる m の状態は磁場あるいは電場と異なる相互作用を行うことになる．その結果 $(2j+1)$ に縮退していたエネルギー状態は $(2j+1)$ 個の状態にわかれる．状態 ψ_m のエネルギーを E_m とすれば $m\to n$ の遷移のさい $h\nu=E_n-E_m$ のエネルギーが放出または吸収され，その遷移確率は§8.6で述べられているように

$$W_{m\to n}=|\langle\psi_n|U(t, t_0)|\psi_m\rangle|^2 \tag{8.6.11}$$

で与えられる．これは $U(t, t_0)$ がわかれば直接計算すればよいわけであるが，U の形によっては ψ_m の性質だけを使っても，どのような遷移が $W_{m\to n}=0$ か，す

なわち禁止される遷移 $m \to n$ を簡単に知ることができる．

ここで古典力学における角運動量の合成と量子力学におけるそれとを比較しておくのは意味があろう．周知のように，古典力学における角運動量の合成はベクトルの和として一意的にきまり，合成された角運動量の成分はもとのそれぞれのベクトルの成分の和として表される．これに対し量子力学における2つの角運動量 $\boldsymbol{j}_1$ と $\boldsymbol{j}_2$ を合成すると，これまで説明したように既約分解によって $j=j_1+j_2, j_1+j_2-1, \cdots, |j_1-j_2|$ の量子数をもつ $\boldsymbol{j}$ が許される．つぎに固有ベクトルについて考えよう．$\boldsymbol{j}$ の成分に相当するのは表現空間 V^{2j+1} における固有ベクトルであるから，それは $\boldsymbol{j}_1$ の表現空間 V^{2j_1+1} における固有ベクトル $\psi_{m_1}{}^{j_1}$ および $\boldsymbol{j}_2$ の $\psi_{m_2}{}^{j_2}$ で表されるはずである．すでに $j_1=1/2,\ j_2=1/2$ の場合については具体的な形を求めたが一般的には相当面倒である．そこで

$$\psi_m{}^j = \sum_{m_1 m_2} C(j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 jm) \psi_{m_1}{}^{j_1} \psi_{m_2}{}^{j_2} \tag{8.6.12}$$

における展開係数 $C(j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 jm)$ をあらかじめ求めておく必要が生じてくる．この係数を **Clebsch-Gordan 係数**と呼ぶ．添字を何重にも使う印刷上の不便を避け記法を簡単化して(8.6.12)を

$$\psi(jm) = \sum_{m_1 m_2} \psi(j_1 m_1) \psi(j_2 m_2) (j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 jm) \tag{8.6.13}$$

と書くのがふつうである．2個の角運動量の合成だけならば $(j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 jm)$ の代りに $(j_1 m_1 j_2 m_2 | jm)$ と書いても差支えないが，3個の角運動量の合成の場合を考えて残しておく．Clebsch-Gordan 係数は既約表現 ρ_{j_1} と ρ_{j_2} のテンソル積を既約分解したときの表現空間 V^{2j+1} の固有ベクトルの展開係数であるから，それは $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 次元のユニタリー変換行列の要素になっている．それゆえ Clebsch-Gordan 係数をすべて求めるならばこれまでに説明した既約分解ができたことになる．そして2個の角運動量を合成した結果えられる角運動量のすべての固有ベクトルをもとの角運動量のそれらで，たちどころに書き下すことができる．

$j_2=1/2, 1, 3/2$ の場合の Clebsch-Gordan 係数の表は p. 257, 258 に掲げてある．$j_2=2, 3$ の場合はそれぞれ［Condon, Shortley］p. 77,［山田, 森田］に記載されている．

3個の角運動量 $\boldsymbol{j}_1, \boldsymbol{j}_2, \boldsymbol{j}_3$ の合成は上の手続きを順々に行うしかないだろう．た

だし順序が違うと見掛け上異なった結果がえられ，結合則が破れているように見える．本当にそうなっているか？ まず $\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2=\boldsymbol{j}_{12}$ の固有ベクトルを上にのべた方法で求める．合成の履歴を明示するため $\psi(j_{12}m_{12})$ の代りに $\psi(j_1j_2j_{12}m_{12})$ と書くことにすると，(8.6.13)により

$$\psi(j_1j_2j_{12}m_{12})=\sum_{m_1m_2}\psi(j_1m_1)\psi(j_2m_2)(j_1m_1j_2m_2|j_1j_2j_{12}m_{12}) \qquad (8.6.14)$$

となる．つぎに $\boldsymbol{j}_{12}+\boldsymbol{j}_3$ の固有ベクトルを $\psi(j_1j_2j_{12}j_3JM)$ で表し，同様な展開を行うと

$$\psi(j_1j_2j_{12}j_3JM)=\sum_{m_{12}m_3}\psi(j_1j_2j_{12}m_{12})\psi(j_3m_3)(j_{12}m_{12}j_3m_3|j_{12}j_3JM) \qquad (8.6.15)$$

がえられる．一方，$\boldsymbol{j}_2+\boldsymbol{j}_3=\boldsymbol{j}_{23}$ をまず求め，つぎに $\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_{23}$ の固有ベクトルを計算すると

$$\psi(j_1j_2j_3j_{23}JM)=\sum_{m_1m_{23}}\psi(j_1m_1)\psi(j_2j_3j_{23}m_{23})(j_1m_1j_{23}m_{23}|j_1j_{23}JM) \qquad (8.6.16)$$

となる．一般に $\psi(j_1j_2j_{12}j_3JM)\neq\psi(j_1j_2j_3j_{23}JM)$ であるから確かに個々の固有ベクトルはお互いに一致しない．しかし $\{\psi(j_1j_2j_{12}j_3JM)\}$，$\{\psi(j_1j_2j_3j_{23}JM)\}$ はいずれも $(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)$ 次元の表現空間の基底をつくっているからユニタリー変換で結ばれているであろう．実際

$$\psi(j_1j_2j_3j_{23}JM)=\sum_{j_{12}}\psi(j_1j_2j_{12}j_3JM)\langle j_1j_2j_{12}j_3J|j_1j_2j_{12}j_3J\rangle \qquad (8.6.17)$$

なるユニタリー変換を作ることができる．この変換行列の要素を

$$\langle j_1j_2j_{12}j_3J|j_1j_2j_{12}j_3J\rangle=\sqrt{(2j_{12}+1)(2j_{23}+1)}\,W(j_1j_2Jj_3;j_{12}j_{23}) \qquad (8.6.18)$$

と表したとき $W(abcd;ef)$ を **Racah 係数**という．上記変換は M によらないことが証明できるので，表記に省いてある(その証明については，たとえば[山内] pp. 145–146 を参照)．

こうして量子力学的な角運動量についてもユニタリー同値の意味で加法の結合則

$$(\boldsymbol{j}_1+\boldsymbol{j}_2)+\boldsymbol{j}_3=\boldsymbol{j}_1+(\boldsymbol{j}_2+\boldsymbol{j}_3) \qquad (8.6.19)$$

が成り立つことがわかった．

上の計算から明らかなように Racah 係数は Clebsch-Gordan 係数で表される．

Clebsch-Gordan 係数の一般式を導くことはここではしないが，角運動量の固有ベクトルを前にのべた u_1, v_1, u_2, v_2 の多項式で表すことによって代数的に求められることを付記して本節を結ぶ(Clebsch-Gordan 係数の導出に興味のある読者は [山内]，[van der Waerden] などを参照されたい).

§8.7　Galilei 変換

これまで扱ってきた変換は，空間や時間の連続性だけでなく，空間の均質性および等方性を定式化したものと解釈することができる．すなわち3次元 Euclid 空間における座標系の平行移動および回転はそれぞれ空間の均質性および等方性を前提としており，われわれはこの空間の中に平行移動や回転によって変化をうけないハミルトニアンをもつ力学系を考えることによって，運動量および角運動量の概念をそれらの変換がつくる群の Lie 代数として導くことができた．その場合，われわれはできるだけ量子力学の論理に忠実であろうとして，それらの Lie 代数の射線表現を試みた結果，運動量も角運動量もともにベクトル表現と同値であることを知った．だがこれから述べるように物理学で重要な意味をもつ座標系の変換には射線表現がベクトル表現と同値でないものがある．

そもそも物理学において座標系とはそれぞれの観測者がそれに依拠して測定を行うために設定する枠組(reference frame)に他ならず，その選定は観測しようとする物理現象に内在する物理法則と深く関わりあう．古典力学においてそれは慣性系であり，この座標系の変換は Newton の運動方程式をつねに同じ形に表すことを可能にする Galilei 変換であった．すなわちこの場合，座標系の変換は古典力学的物理法則の定式化の本質そのものに関係している．Galilei 変換とは，お互いに等速度で運動している2人の観測者にとって力学法則は同じ形で現れることを Galileo が Newton に先立って見い出していたことから命名されたものであり，Newton 力学は Galilei 変換の定式化と見ることもできる．Galilei 変換はさらに Maxwell の電磁方程式への拡張を通じ Lorentz 変換に導かれるがそれらについては本講座第2巻『古典物理学Ⅱ』に譲り，ここでは Galilei 変換をこれまでに説明した方法で扱うことによってそれと量子力学との関わりあいを調べることにしたい．

ふつう Galilei 変換として $\boldsymbol{x}=(x_1, x_2, x_3)$ を空間座標，t を時間としたとき座

標系の相対速度 $\boldsymbol{v}=(v_1, v_2, v_3)$ をパラメーターとして，4次の正方行列を使って

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ t\end{bmatrix}\longrightarrow\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}'\\ t'\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{1} & -\boldsymbol{v}\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ t\end{bmatrix} \qquad (8.7.1)$$

のように表されるものが使われる．この変換が可換な連続群をつくることはいうまでもない．この群を以下のべるような理由でわれわれは**狭義の Galilei 群** G_0 と呼ぶことにする．群 G_0 は§8.4で説明した平行移動群と同型であるから，G_0 の Lie 代数 $\mathfrak{g}_0$ の射線表現は一般にベクトル表現と同値ではない．しかし平行移動群を回転群を含めた I_3^3 の部分群とすれば，その射線表現はベクトル表現と同値になった(p. 584 の証明を思い出してほしい)．これと同じようなことが G_0 についても起こらないか．本来の Galilei の思想に忠実であるためには座標系の回転および等速運動も含めた一般的な変換

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ t\\ 1\end{bmatrix}\longrightarrow\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}'\\ t'\\ 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}R & -\boldsymbol{v} & -\boldsymbol{u}\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ t\\ 1\end{bmatrix} \qquad (8.7.2)$$

をこそ Galilei 変換と呼ぶべきである．われわれはこれがつくる群を**広義の Galilei 群** G あるいは単に Galilei 群 G と呼び，これについて調べることにする．

群 G は9個のパラメーターをもつ連続群であるが，'乗積表' を見やすくするためその元を $g(R, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{u})$ のように表す．(8.7.2)の行列表現を使えば

$$g(R, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{u})\cdot g(R', \boldsymbol{v}', \boldsymbol{u}') = g(RR', R\boldsymbol{v}'+\boldsymbol{v}, R\boldsymbol{u}'+\boldsymbol{u}) \qquad (8.7.3)$$

なることは容易に知られ，これから

$$G_0 = \{g(1, \boldsymbol{v}, 0)\} \subset G \qquad (8.7.4)$$

$$T_3 = \{g(1, 0, \boldsymbol{u})\} \subset G \qquad (8.7.5)$$

$$G_0' = \{g(1, \boldsymbol{v}, \boldsymbol{u})\} \subset G \qquad (8.7.6)$$

$$I_3^3 = \{g(R, 0, \boldsymbol{u})\} \subset G \qquad (8.7.7)$$

などの部分群が存在することが直ちにわかる．部分群はまだこの他にも存在するがここでは重要ではない．

部分群 G_0' は明らかに可換群であり，G_0' の Lie 代数の射線表現は前に調べた T_3 の Lie 代数と同じような性質をもつことが一応予想される．まずこれまでの方法でもとの G の Lie 代数の構造を求めると(8.4.18), (8.4.19), (8.4.20)の他に

$$[\hat{R}_1, \hat{K}_2] = -\hat{K}_3, \quad [\hat{R}_1, \hat{K}_3] = \hat{K}_2, \quad \cdots \tag{8.7.8}$$

$$[\hat{K}_1, \hat{K}_2] = 0, \quad [\hat{K}_2, \hat{K}_3] = 0, \quad [\hat{K}_3, \hat{K}_1] = 0 \tag{8.7.9}$$

$$[\hat{K}_i, \hat{T}_j] = 0 \tag{8.7.10}$$

が現れる．ここに

$$\hat{K}_1 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}, \quad \hat{K}_2 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}, \quad \hat{K}_3 = \begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}$$

である．$\hat{R}_j$, $\hat{T}_j$ については§8.4を思い出せばわざわざ説明するまでもないであろう．

このLie代数の射線表現について，われわれはすでに(8.4.18), (8.4.19), (8.4.20)の射線表現がベクトル表現に同値であることを証明しているから(8.7.8), (8.7.9), (8.7.10)について調べればよい．しかも幸いなことに(8.7.8)と(8.7.9)はこれまでと全く同じようにしてその射線表現がベクトル表現と同値であることが証明できる．それゆえ残された問題は(8.7.10)についてだけとなる．実はこれについても前に述べた方法がそのまま使える．ただし結果は異なる！

(8.7.10)の射線表現を前に用いたΞで表すと

$$i[D(\hat{K}_j), D(\hat{T}_k)] = \Xi(\hat{K}_j, \hat{T}_k) \tag{8.7.11}$$

となるから，代数関係(8.4.19), (8.4.20), (8.7.9)および(8.7.10)を参照しつつ計算すると((8.4.28), (8.4.29)の計算を参照し，読者自ら行ってみられたい)

$$\Xi(\hat{K}_1, \hat{T}_1) = \Xi(\hat{K}_2, \hat{T}_2) = \Xi(\hat{K}_3, \hat{T}_3) \tag{8.7.12}$$

$$\Xi(\hat{K}_j, \hat{T}_k) = 0 \qquad (j \neq k) \tag{8.7.13}$$

がえられる．それゆえ(8.7.11)は

$$i[D(\hat{K}_j), D(\hat{T}_k)] = \kappa\delta_{jk} \tag{8.7.14}$$

に帰着する．ここにκは任意の実数で$\kappa=0$とおかなければならない根拠は見い出すことができない．

われわれは狭義のGalilei群G_0を空間の回転および平行移動を含む$I_3{}^3$と関係づけることによって射線表現の同値類をベクトル表現に絞ることができないかと期待したが，(8.7.14)で示される非ベクトル表現が残った．これはG_0とT_3が

空間の回転を媒介にして相互に関係していることを示すものである．本節の冒頭で触れたように Galilei 変換が古典力学においてもつ重要な意味と，微小平行移動の演算が量子力学において粒子の運動量を表すことを考え合せるならば，Galilei 変換の生成演算子の量子力学的表現，すなわち射線表現である $D(\hat{K}_j)$ $(j=1,2,3)$ に何らかの力学量を対応させてみるのが自然であろう．

そこで $D(\hat{T}_k)=\hat{p}_k$, $D(\hat{K}_j)=\hat{q}_j$, $\kappa=-\hbar$ とおいて(8.7.14)を書きかえると

$$[\hat{q}_j, \hat{p}_k]=i\hbar\delta_{jk} \tag{8.7.15}$$

がえられる．$\hat{q}_j$ の物理的意味を探るために，Newton の運動方程式に対応する量子力学的運動方程式

$$i\hbar\frac{d\hat{X}}{dt}=[\hat{X}, \hat{H}] \tag{8.7.16}$$

を援用しよう．ここに $\hat{H}$ は考えている力学系のハミルトニアン，$\hat{X}$ は任意の力学量である．(8.7.16)はこれまでと同じ代数方程式であり，[,]の意味も全く同じである．われわれはすでに $(\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3)$ が1個の粒子の運動量を表すことを知っているから，自由な質量 m の1個の粒子の $\hat{H}$ は

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{p}_1{}^2+\hat{p}_2{}^2+\hat{p}_3{}^2) \tag{8.7.17}$$

と書くことができる．(8.7.16)の $\hat{X}$ として $\hat{q}_j$ を，$\hat{H}$ として(8.7.17)を代入し(8.7.15)の関係だけを用いることによって

$$\frac{d}{dt}\hat{q}_j=\frac{1}{m}\hat{p}_j \tag{8.7.18}$$

がえられる．この関係式から $\hat{q}_j$ は粒子の位置を与える演算子の j 成分であることがわかる．このように $\hat{q}_j$ の意味がきまれば，(8.7.17)のハミルトニアンとして

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{p}_1{}^2+\hat{p}_2{}^2+\hat{p}_3{}^2)+V(\hat{q}_1, \hat{q}_2, \hat{q}_3) \tag{8.7.19}$$

を用いてもよく，この場合も(8.7.18)と同じ結果がえられる．それゆえ $\hat{q}_j$ はポテンシャルの有無にかかわらず粒子の位置という物理量の量子力学的表現になっている，ということができる．量子力学における最も基本的な関係の一つである正準交換関係(8.7.15)が Galilei 変換の量子力学的表現としてえられたことは当然とはいえ，注目に値しよう．

§8.8 ゲージ変換

量子力学は古典力学の複素 Hilbert 空間におけるユニタリーな射線表現になっていることを見てきたが，ここで演算子の一般的な位相変換を考えることにしよう．射線表現がベクトル表現と異なるのは，1個の粒子を例にとっていえば $f(\boldsymbol{x}) \in \mathrm{H}_3$ の代りに $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})=\{e^{i\alpha}f(\boldsymbol{x}) : \alpha \in \mathrm{R}\}$ を用いることにあった．これまでは α を実数パラメーターとしてきたが，より一般的に，実数値関数 $\chi(\boldsymbol{x}, t)$ をとってみよう．その場合も射線の内積

$$\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{g} = |(f, g)|$$

は不変である．しかし $\boldsymbol{f}\cdot\hat{O}\boldsymbol{g}=|(f\cdot\hat{O}g)|$ については，つぎの注意が必要になる．

いま

$$f \longrightarrow f' = \exp\left[i\chi(\hat{\boldsymbol{x}}, t)\right]f \tag{8.8.1}$$

$$g \longrightarrow g' = \exp\left[i\chi(\hat{\boldsymbol{x}}, t)\right]g \tag{8.8.2}$$

なる位相変換が行われたとき，

$$(f', \hat{O}'g') = (f, \hat{O}g) \tag{8.8.3}$$

とするためには

$$\hat{O} \longrightarrow \hat{O}' = \exp\left[+i\chi(\hat{\boldsymbol{x}}, t)\right]\hat{O}\exp\left[-i\chi(\hat{\boldsymbol{x}}, t)\right] \tag{8.8.4}$$

になっていなければならない．これから直ちに

$$\begin{cases} \hat{x} \longrightarrow \hat{x}' = \hat{x} & (8.8.5) \\ \hat{p}_x \longrightarrow \hat{p}_x{}' = \hat{p}_x - \hbar\dfrac{\partial}{\partial x}\chi(\hat{\boldsymbol{x}}, t) & (8.8.6) \end{cases}$$

がえられる．$\hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ についても同様な結果がえられる．それらをまとめて

$$\hat{\boldsymbol{x}} \longrightarrow \hat{\boldsymbol{x}}' = \hat{\boldsymbol{x}} \tag{8.8.7}$$

$$\hat{\boldsymbol{p}} \longrightarrow \hat{\boldsymbol{p}}' = \hat{\boldsymbol{p}} - \hbar\,\mathrm{grad}\,\chi(\hat{\boldsymbol{x}}, t) \tag{8.8.8}$$

と書く．

つぎに f を解とする Schrödinger 方程式における $\hat{H}$ として

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{p}} - \boldsymbol{a}(\hat{\boldsymbol{x}}))^2 + b(\hat{\boldsymbol{x}}) \tag{8.8.9}$$

を用い，それを f' についての方程式に書きかえてみる．

$$i\hbar\frac{d}{dt}(\exp\left[-i\chi(\hat{\boldsymbol{x}}, t)\right]f') = \hat{H}\exp\left[-i\chi(\hat{\boldsymbol{x}}, t)\right]f'. \tag{8.8.10}$$

左から $\exp[i\chi(\hat{\boldsymbol{x}},t)]$ を掛けて式を整理すると

$$i\hbar\frac{d}{dt}f' = \left\{\frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{p}}-\boldsymbol{a}(\hat{\boldsymbol{x}})-\hbar\,\mathrm{grad}\,\chi(\hat{\boldsymbol{x}},t))^2+b(\hat{\boldsymbol{x}})-\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi(\hat{\boldsymbol{x}},t)\right\}f' \tag{8.8.11}$$

がえられる．実は，(8.8.9)を導くとき，$\boldsymbol{a}$ や b に時間 t があらわに入っていても差支えなかった．たびたび注意するように t は単なるパラメーターに過ぎず，観測量ではないからである．そこで，あらためて $\boldsymbol{a}$ や b の代りに $(e/c)\boldsymbol{A}, e\phi$ とおき，χ の方も $(e/\hbar c)\chi$ でおきかえると，われわれは変換の前と後でそれぞれつぎの Schrödinger 方程式をうる．

$$i\hbar\frac{d}{dt}f = \left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\phi\right\}f \tag{8.8.12}$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}f' = \left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}(\boldsymbol{A}+\mathrm{grad}\,\chi)\right)^2+e\left(\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\chi\right)\right\}f'. \tag{8.8.13}$$

(8.8.13)において

$$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A}+\mathrm{grad}\,\chi, \qquad \phi' = \phi-\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\chi \tag{8.8.14}$$

とおくと

$$i\hbar\frac{d}{dt}f' = \left\{\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}'\right)^2+e\phi'\right\}f'$$

となる．$\hat{\boldsymbol{p}}$ には $'$ がついていない点に注意されたい．(8.8.14)は Maxwell 方程式を不変にする変換の 1 つであるゲージ変換そのものであるが，それがゲージ変換とよばれるのは，本講座第 2 巻『古典物理学 II』でのべられているように，Weyl が時空の尺度は各点で任意にとれるという要請から導いたものと一致するからである．もちろんそのさいは時空座標は実数で記述された．複素 Hilbert 空間においては何を尺度とするか問題であるが，前節で $\hbar$ を導入するとき示唆した実パラメーターの測定の単位をとるのが 1 つの自然な考え方であろう．そうすれば，(8.8.1)は空間の各点で尺度(gauge)を任意に選ぶことを意味する．それゆえ，これを量子力学におけるゲージ変換と呼ぶのは，(8.8.14)により形式的に定義するより，Weyl のもとの精神により近いということができる．

§8.9　力学系に内在する対称性

これまでわれわれは，非相対論的な時空の中で力学系のもつ対称性を，座標系の種々の変換に対する物理量の共変性という，いわば力学系を外側から眺める立場で調べてきた．もちろん，それらの変換は量子力学的に表現されねばならず，そうすることによってHilbert空間の射線や演算子として，対称性がもつ物理的意味が鮮明に浮かび上がってきた．しかし，そのような本来古典的な変換群から導かれる対称性の他に，力学系に内在する対称性も存在しうる．そのような対称性を力学的対称性(dynamical symmetry)と呼ぶ．その端的な例は水素原子のSchrödinger方程式にみられるKepler運動の対称性で，それは後でのべるように相互作用の本質に深く根ざしたものである．その説明の準備として次の例から話を始めよう．

例1　2次元の等方的調和振動子

粒子の質量を m としたときハミルトニアンが

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{p}_x{}^2+\hat{p}_y{}^2)+\frac{m\omega^2}{2}(\hat{x}^2+\hat{y}^2) \qquad (8.9.1)$$

で与えられる運動が xy 面での回転に対して不変であることは一目でわかるが，それ以外に対称性はないであろうか．われわれはすでに§2.4e)で，1次元の調和振動子の場合，生成演算子や消滅演算子が便利に用いられることを学んだ．それをここでも手がかりとしよう．すなわち，つぎのようにして $a, a^\dagger, b, b^\dagger$ を定義して(8.9.1)を書き直してみる．

$$a=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}+\frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x \qquad (8.9.2)$$

$$a^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x}-\frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_x \qquad (8.9.3)$$

$$b=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{y}+\frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_y \qquad (8.9.4)$$

$$b^\dagger=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{y}-\frac{i}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\hat{p}_y \qquad (8.9.5)$$

$$\hat{H}=\omega\hbar(a^\dagger a+b^\dagger b+1). \qquad (8.9.6)$$

エネルギーの固有値およびその縮退度を知るだけならば，(8.9.6)と交換関係

$$[a, a^\dagger]=1, \qquad [b, b^\dagger]=1, \qquad \text{その他は}\,0 \qquad (8.9.7)$$

を用いれば十分である.

しかし，われわれはつぎの例のために，やや技巧的かも知れないが，次のような演算子を作ってみよう.

$$K_+ = ia^\dagger b^\dagger, \qquad K_- = iab, \qquad K_0 = \frac{1}{2}(a^\dagger a + b^\dagger b + 1) \equiv \frac{\hat{H}}{2\omega\hbar} \qquad (8.9.8)$$

これらが(8.4.48)で $\hbar=1$ とおいた交換関係と全く同じ

$$[K_0, K_\pm] = \pm K_\pm, \qquad [K_+, K_-] = 2K_0 \qquad (8.9.9)$$

を満たしていることは直ちに知られる．これから，K_0 の固有値は 0, ±1/2, ±1, ±3/2, … であることが導かれる．しかしこの場合は

$$\int \psi^* (a^\dagger a + b^\dagger b) \psi d^3x = \|a\psi\|^2 + \|b\psi\|^2 \geqq 0 \qquad (8.9.10)$$

を考慮すれば，$\hat{H}$ の固有値は $E_n = \omega\hbar(n+1)$ $(n=0, 1, 2, \cdots)$ と書かれる．もちろんこの式だけなら，(8.9.7) からえられる $a^\dagger a = n_a$, $b^\dagger b = n_b$ が 0 および正の整数であることから簡単に知られる．ところで(8.9.9)は $SU(2)$ の Lie 代数の構造そのものであるから，この力学系が $SU(2)$ 対称性をもっていることが推察される．これを確かめるには，演算子を要素とする行列

$$\boldsymbol{\Psi} = \sqrt{\frac{\omega\hbar}{2}} \begin{bmatrix} a & b \\ -b^\dagger & a^\dagger \end{bmatrix} \qquad (8.9.11)$$

を考えると便利である．ここで

$$\boldsymbol{\Psi}^\dagger = \sqrt{\frac{\omega\hbar}{2}} \begin{bmatrix} a^\dagger & -b \\ b^\dagger & a \end{bmatrix} \qquad (8.9.12)$$

とし，

$$\mathrm{tr}\,(\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\Psi}^\dagger) = \omega\hbar(a^\dagger a + b^\dagger b + 1) = \hat{H} \qquad (8.9.13)$$

なることに着目すれば，$\hat{H}$ の $SU(2)$ に対する不変性は

$$\boldsymbol{\Psi} \longrightarrow \boldsymbol{\Psi}' = T(g)\boldsymbol{\Psi} \equiv g\boldsymbol{\Psi}g^{-1}, \qquad g \in SU(2) \qquad (8.9.14)$$

に対する $\mathrm{tr}\,(\boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\Psi}^{-1})$ の不変性としてとらえることができる．ただし，この場合 $SU(2)$ の元 g は 2 行 2 列の複素行列で表現されているとする．すなわち

$$g = \begin{bmatrix} z_1 & z_2 \\ -z_2{}^* & z_1{}^* \end{bmatrix}, \qquad z_1 z_1{}^* + z_2 z_2{}^* = 1, \qquad z_1, z_2 \in \mathrm{C} \qquad (8.9.15)$$

である.

例2　Kepler 運動における対称性

Newton 力学がその初期の段階で最も目覚ましい成功を収めたのが惑星運動における Kepler の法則の力学的究明であったと同様に，量子力学的な Kepler 運動である水素原子における電子の運動は，量子力学の出発点としても重要な意味をもっている．それは，量子力学建設の翌 1926 年には，すでに Pauli によって，古典力学との対応をもとに深く調べられている．その後も何人かの人々によって，いろいろな角度から研究が行われてきた．しかし，それらのすべてを通じて，古典力学の諸概念への強い依存度が見られる．古典力学における運動の恒量として，Kepler 運動の場合，角運動量ベクトルの他に Runge-Lenz のベクトルがあることは，すでに解析力学の創始者 Lagrange によって見い出されていたというが，これに十分な量子力学的表現を与えたのは Pauli であった．それゆえ，われわれはこれを Runge-Lenz-Pauli のベクトルと呼ぶことにしよう．

従来は，Runge-Lenz-Pauli のベクトルの存在を対応論的に仮定することによって，Kepler 運動の対称性を論じてきた．しかし，ここでは基本的な正準交換関係だけを用い，もとのハミルトニアンから直接，角運動量ベクトルおよび Runge-Lenz-Pauli のベクトルを導き，両者が本質的に同種の対称性からえられることを示そう ([Ravndal, Toyoda])．そしてその過程で Kepler 運動が $O(3)$ より広い群に対する対称性をもつことを説明する．この対称性は従来 $O(4)$，すなわち 4 次元実 Euclid 空間の回転群に対する不変性といわれてきたが，このようないい方は適切ではないように思われる．その理由は，これからの議論で次第に明らかになるであろう．

質量 m，電荷 e の 1 個の粒子が e の電荷をもつ 1 点から Coulomb の力だけを受けて運動しているとする．ハミルトニアンは

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\hat{p}_x{}^2+\hat{p}_y{}^2+\hat{p}_z{}^2)-\frac{e^2}{\sqrt{\hat{x}^2+\hat{y}^2+\hat{z}^2}}. \qquad (8.9.16)$$

ここで，つぎの座標を導入する：

$$\left.\begin{aligned} x &= \mu\nu\cos\varphi \\ y &= \mu\nu\sin\varphi \\ z &= \frac{1}{2}(\mu^2-\nu^2) \end{aligned}\right\} \qquad (8.9.17)$$

これはふつう‘放物線座標(parabolic coordinates)’と呼ばれているもの

$$\left.\begin{aligned} x &= \sqrt{\mu\nu}\cos\varphi \\ y &= \sqrt{\mu\nu}\sin\varphi \\ z &= \frac{1}{2}(\mu-\nu) \end{aligned}\right\} \tag{8.9.17$'$}$$

と余り異ならないように思われるが，われわれは後で μ, ν の‘複素数化’を行うため，両者の違いは重要である．その意味で(8.9.17)で定義される(μ, ν, φ)を**2乗放物線座標**(squared parabolic coordinates)と呼ぶことにしたい．さて，この座標を用いて(8.9.16)を書きかえると，

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{\mu^2+\nu^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\mu^2}+\frac{1}{\mu}\frac{\partial}{\partial\mu}\right)+\frac{1}{\mu^2+\nu^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial\nu^2}+\frac{1}{\nu}\frac{\partial}{\partial\nu}\right)+\frac{1}{\mu^2\nu^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}-\frac{2e^2}{\mu^2+\nu^2} \tag{8.9.18}$$

となる．いま問題にしているのは束縛状態であるから，$\hat{H}$ の固有値 E_i は負としてよい．それを

$$E_i = -\frac{m}{2}\omega_i^2\hbar^2 \tag{8.9.19}$$

とし，Schrödinger 方程式

$$\hat{H}\psi_i = E_i\psi_i \tag{8.9.20}$$

に(8.9.18)を代入して両辺に$(\mu^2+\nu^2)$をかけ，整理すると

$$(\hat{H}_\mu+\hat{H}_\nu)\psi_i = 2e^2\psi_i \tag{8.9.21}$$

がえられる．ただし

$$\hat{H}_\mu \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\mu^2}+\frac{1}{\mu}\frac{\partial}{\partial\mu}+\frac{1}{\mu^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+\frac{m}{2}\omega_i^2\hbar^2\mu^2 \tag{8.9.22}$$

$$\hat{H}_\nu \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\nu^2}+\frac{1}{\nu}\frac{\partial}{\partial\nu}+\frac{1}{\nu^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+\frac{m}{2}\omega_i^2\hbar^2\nu^2 \tag{8.9.23}$$

である．(8.9.22), (8.9.23)は極座標であらわした2次元の調和振動子のハミルトニアンの形になっている．実際，新しく φ_μ, φ_ν を導入し，

$$\xi_\mu = \mu\cos\varphi_\mu, \qquad \eta_\mu = \mu\sin\varphi_\mu \tag{8.9.24}$$

$$\xi_\nu = \nu\cos\varphi_\nu, \qquad \eta_\nu = \nu\sin\varphi_\nu \tag{8.9.25}$$

ただし

$$\frac{\partial^2}{\partial \varphi_\mu{}^2} = \frac{\partial^2}{\partial \varphi_\nu{}^2} = \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \tag{8.9.26}$$

とおいて，(8.9.22), (8.9.23)を2組の‘直交座標’(ξ_μ, η_μ), (ξ_ν, η_ν)であらわしてみよう．そうすると

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi_\mu{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial \eta_\mu{}^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega_\iota{}^2\hbar^2(\xi_\mu{}^2+\eta_\mu{}^2) = \hat{H}_\mu \tag{8.9.27}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi_\nu{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial \eta_\nu{}^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega_\iota{}^2\hbar^2(\xi_\nu{}^2+\eta_\nu{}^2) = \hat{H}_\nu \tag{8.9.28}$$

となり，$\hat{H}_\mu$, $\hat{H}_\nu$ 共に，例1で扱った2次元の等方的調和振動子のハミルトニアンの形と全く同じであることがわかる．それゆえ，例1の方法を使って，それぞれの‘固有値’を直ちに求めることができる．それらをλ_{μ_ι}, λ_{ν_ι}とおくと，一応別々に

$$\lambda_{\mu_\iota} = \omega_\iota(n_{\mu_\iota}+1)\hbar^2 \qquad (n_{\mu_\iota}=0, 1, 2, \cdots) \tag{8.9.29}$$

$$\lambda_{\nu_\iota} = \omega_\iota(n_{\nu_\iota}+1)\hbar^2 \qquad (n_{\nu_\iota}=0, 1, 2, \cdots) \tag{8.9.30}$$

となるが，(8.9.21)の条件があるから

$$\omega_\iota(n_{\mu_\iota}+n_{\nu_\iota}+2)\hbar^2 = 2e^2 \tag{8.9.31}$$

でなくてはならない．したがって(8.9.10)により，求める$\hat{H}$の固有値は

$$E_\iota = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\left(\frac{n_{\mu_\iota}+n_{\nu_\iota}}{2}+1\right)^{-2} \tag{8.9.32}$$

となる．ただし，これまでの議論では，n_{μ_ι}とn_{ν_ι}は全く独立であるから，(8.9.32)の代りによく知られている

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}(n+1)^{-2} \qquad (n=0, 1, 2, \cdots) \tag{8.9.33}$$

の形に書くことはできない．実は，(8.9.27)と(8.9.28)は独立な式ではなく，(8.9.26)の条件でお互いに結びつけられている．そのため

$$n_{\mu_\iota}+n_{\nu_\iota} = 2n \tag{8.9.34}$$

になるのである．

われわれの目的は(8.9.33)なる周知の式を導くこと，したがってそのため(8.9.34)を証明することだけにあるのではない．軌道角運動量$\hat{L}$とRunge-Lenz-Pauliベクトル$\hat{A}$を同時に導き，ハミルトニアン(8.9.16)に含まれる内部的な対称性を明らかにすることにある．それゆえ，今度は直接微分演算子を用い

て，これからの議論に必要な演算子を定義しておこう．

$$\left.\begin{aligned} a_\mu &= \sqrt{\frac{m\omega_i}{2}}\xi_\mu + \frac{1}{\sqrt{2m\omega_i}}\frac{\partial}{\partial\xi_\mu} \\ a_\mu^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega_i}{2}}\xi_\mu - \frac{1}{\sqrt{2m\omega_i}}\frac{\partial}{\partial\xi_\mu} \\ b_\mu &= \sqrt{\frac{m\omega_i}{2}}\eta_\mu + \frac{1}{\sqrt{2m\omega_i}}\frac{\partial}{\partial\eta_\mu} \\ b_\mu^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega_i}{2}}\eta_\mu - \frac{1}{\sqrt{2m\omega_i}}\frac{\partial}{\partial\eta_\mu} \end{aligned}\right\} \tag{8.9.35}$$

上の定義に $\hbar$ や i が現れないのに注意されたい．これらの演算子で可換でないのは

$$[a_\mu, a_\mu^\dagger] = 1, \qquad [b_\mu, b_\mu^\dagger] = 1 \tag{8.9.36}$$

だけである．さらにこれらを組み合わせて

$$\left.\begin{aligned} A_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_\mu + ib_\mu), & A_- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_\mu - ib_\mu) \\ A_+^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_\mu^\dagger - ib_\mu^\dagger), & A_-^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_\mu^\dagger + ib_\mu^\dagger) \end{aligned}\right\} \tag{8.9.37}$$

をつくれば，可換でないのは

$$[A_+, A_+^\dagger] = 1, \qquad [A_-, A_-^\dagger] = 1 \tag{8.9.38}$$

だけである．全く同じようにして $a_\nu, a_\nu^\dagger, b_\nu, b_\nu^\dagger$ を定義し，

$$\left.\begin{aligned} B_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_\nu + ib_\nu), & B_- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_\nu - ib_\nu) \\ B_+^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_\nu^\dagger - ib_\nu^\dagger), & B_-^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_\nu^\dagger + ib_\nu^\dagger) \end{aligned}\right\} \tag{8.9.39}$$

とおけば，やはり

$$[B_+, B_+^\dagger] = 1, \qquad [B_-, B_-^\dagger] = 1. \tag{8.9.40}$$

その他の組は可換になる．これで準備は整ったから，$A_\pm, A_\pm^\dagger, B_\pm, B_\pm^\dagger$ からつぎの 2 組の Lie 代数を構成し，それらの性質を調べてみよう．

$$\left.\begin{aligned} X_0 &= \frac{1}{2}(A_+^\dagger A_+ - B_-^\dagger B_-), & Y_0 &= \frac{1}{2}(B_+^\dagger B_+ - A_-^\dagger A_-) \\ X_+ &= A_+^\dagger B_-, & Y_+ &= -B_+^\dagger A_- \\ X_- &= A_+ B_-^\dagger, & Y_- &= -B_+ A_-^\dagger \end{aligned}\right\} \tag{8.9.41}$$

これらが，それぞれ $SU(2)$ の Lie 代数の構造

$$\left.\begin{array}{ll}[X_+, X_-] = 2X_0, & [Y_+, Y_-] = 2Y_0 \\ [X_0, X_\pm] = \pm X_\pm, & [Y_0, Y_\pm] = \pm Y_\pm\end{array}\right\} \tag{8.9.42}$$

(ただし複号同順) を持っていることは容易に確かめられる．ここで

$$\left.\begin{array}{ll}X_1 \equiv \dfrac{1}{2}(X_+ + X_-), & Y_1 \equiv \dfrac{1}{2}(Y_+ + Y_-) \\ X_2 \equiv \dfrac{1}{2i}(X_+ - X_-), & Y_2 \equiv \dfrac{1}{2i}(Y_+ - Y_-) \\ X_3 \equiv X_0, & Y_3 \equiv Y_0\end{array}\right\} \tag{8.9.43}$$

とおき，X_i, X_j の内積を

$$(X_i, X_j) = \mathrm{tr}\,(X_i X_j^\dagger) \tag{8.9.44}$$

で定義する．Y_i, Y_j についても同様．そうすると (X_1, X_2, X_3)，(Y_1, Y_2, Y_3) はそれぞれ‘直交’する‘基底ベクトル’になっていることがわかる．大変手間どったが，これで望みの軌道角運動量ベクトル $\hat{\boldsymbol{L}}$ と Runge-Lenz-Pauli のベクトル $\hat{\boldsymbol{A}}$ が求められた．すなわち

$$\left.\begin{array}{ll}\hat{L}_x = X_1 + Y_1, & \hat{A}_x = X_1 - Y_1 \\ \hat{L}_y = X_2 + Y_2, & \hat{A}_y = X_2 - Y_2 \\ \hat{L}_z = X_3 + Y_3, & \hat{A}_z = X_3 - Y_3\end{array}\right\} \tag{8.9.45}$$

である．やや面倒な変数変換でもとの Descartes 座標に戻せば，たしかに

$$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{x}} \times \hat{\boldsymbol{p}}, \qquad \hat{\boldsymbol{A}} = \sqrt{\frac{m}{-2E}}\left\{\frac{1}{2}\left(\hat{\boldsymbol{L}} \times \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m} - \frac{\hat{\boldsymbol{p}}}{m} \times \hat{\boldsymbol{L}}\right) + e^2 \frac{\hat{\boldsymbol{x}}}{|\hat{\boldsymbol{x}}|}\right\} \tag{8.9.46}$$

になっている．$\hat{\boldsymbol{L}}, \hat{\boldsymbol{A}}$ の Descartes 座標による表現を見れば，$\hat{\boldsymbol{L}}$ が軸性ベクトル，$\hat{\boldsymbol{A}}$ が極性ベクトルであることがすぐわかるが，(8.9.46) からはより簡単に知られる．なぜなら，鏡映変換は (8.9.17) からわかるように μ と ν をとりかえることであり，それは (8.9.45) で X_i と Y_i $(i=1, 2, 3)$ を交換することに他ならないからである．

さて (8.9.26) の条件は，‘軌道角運動量の z 成分’に相当する $\partial/\partial\varphi_\mu$ と $\partial/\partial\varphi_\nu$ の固有値の 2 乗が等しいことを意味する．それには X_0 と Y_0 の固有値の 2 乗が等しければよい．

$$M_+ = A_+^\dagger A_+, \quad M_- = A_-^\dagger A_-, \quad N_+ = B_+^\dagger B_+, \quad N_- = B_-^\dagger B_- \tag{8.9.47}$$

とおけば，(8.9.38)と(8.9.40)より M_+, M_-, N_+, N_- の固有値 m_+, m_-, n_+, n_- は0または正の整数である．(8.9.41)より X_0, Y_0 の固有値はそれぞれ m_+-n_- および n_+-m_- であるから，(8.9.26)の条件は

$$m_+-n_- = n_+-m_- \tag{8.9.48}$$

あるいは

$$m_+-n_- = -n_++m_- \tag{8.9.49}$$

となる．(8.9.48)より $m_++m_-=n_++n_-$ が，また(8.9.49)より $m_++n_+=m_-+n_-$ がえられる．それゆえ，いずれの場合でも $n_{\mu t}+n_{\nu t}=m_++m_-+n_++n_-=2n$ $(n=0, 1, 2, \cdots)$ が成立する．

われわれは例1によって2次元の等方的調和振動子が $SU(2)$ 対称性をもっていることを知った．Kepler 運動は本例のような変数変換によって‘μ 空間’での2次元等方的調和振動子と‘ν 空間’でのそれに分解され，それらがそのさい導入された‘角度’ φ_μ, φ_ν に関する微分演算子の条件(8.9.26)で結びつけられている．それぞれの‘空間’における演算が $SU(2)$ 対称性をもつことから，全体としては $SU(2)\otimes SU(2)$ の対称性をもつことがわかる．ここに $\otimes$ は群の直積を表す．すなわち，$g_1\in SU(2)$，$g_2\in SU(2)$ なるとき g_1 と g_2 を組にしたものを元とする群 G のことである．G のすべての元と可換な正規部分群を C として，商群 G/C をこの場合につくると

$$\frac{SU(2)\otimes SU(2)}{C} \cong SO(4) \tag{8.9.50}$$

なることが群論的に証明できる([Ravndal, Toyoda])．$SO(4)$ は R^4 における回転群で行列式が1に等しいもの，$\cong$ は同型を表す．ここであえて証明なしに抽象的な群論の関係式を用いたのには多少理由がある．

(8.9.42)と(8.9.43)を用いれば，$\hat{L}, \hat{A}$ がそれぞれ

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hat{L}_z, \qquad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hat{L}_x, \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hat{L}_y \tag{8.9.51}$$

$$[\hat{A}_x, \hat{A}_y] = i\hat{A}_z, \qquad [\hat{A}_y, \hat{A}_z] = i\hat{A}_x, \qquad [\hat{A}_z, \hat{A}_x] = i\hat{A}_y \tag{8.9.52}$$

なる $SU(2)$ の Lie 代数の構造をもっているだけでなく，

$$[\hat{L}_x, \hat{A}_y] = i\hat{A}_z, \qquad [\hat{L}_y, \hat{A}_z] = i\hat{A}_x, \qquad [\hat{L}_z, \hat{A}_x] = i\hat{A}_y \tag{8.9.53}$$

なる交換関係が存在することがわかる．そこで，$x_1=x$，$x_2=y$，$x_3=z$ の他に第4番目の実数座標 x_4 をかりに考え，

$$x_1{}^2+x_2{}^2+x_3{}^2+x_4{}^2=1$$

を不変にする4行4列の変換行列 $R_4=(a_{ij})$ $(i, j=1, 2, 3, 4)$ をとると，R_4 の集りは6個の実数パラメーターをもつ連続群になっている．この群を $O(4)$ と書く．その部分群で $\det R_4=1$ なるものを $SO(4)$ とあらわす．この群の局所的構造を調べるために，そのユニタリー表現の Lie 代数をとり

$$\hat{L}_x=\hat{L}_{23},\ \ \hat{L}_y=\hat{L}_{31},\ \ \hat{L}_z=\hat{L}_{12}\,;\ \ \hat{A}_x=\hat{L}_{41},\ \ \hat{A}_y=\hat{L}_{42},\ \ \hat{A}_z=\hat{L}_{43} \tag{8.9.54}$$

とすると，(8.9.51)～(8.9.53)を一括して $SO(4)$ の Lie 代数の構造としてとらえることができる．このため従来はこの方法で Kepler 運動の対称性が論じられてきたが，第4番目の実数軸なるものは物理的に考えにくいだけでなく，$\hat{\boldsymbol{L}}$ と $\hat{\boldsymbol{A}}$ の空間反転に関する性質の違いを保存するためには，第4軸と空間軸をきり離しておかねばならないという制約がつき，4次元の実 Euclid 空間の等方性が失われてしまう．

より本質的には，出発点になったハミルトニアンにあらわれる Coulomb ポテンシャルが物理的にどのような意味をもつか，という問題を考えるべきである．これは荷電粒子と電磁場との相互作用の静的近似(static approximation)として得られたものであり，その対称性のもとを探れば，それは電磁場との相互作用の場の理論的取扱いの中に見い出されるはずである．その場合，$SU(2)\otimes SU(2)$ の方が空間反転に関する性質を考慮に入れる上でも便利である．しかし，その説明は相対論的場の理論を必要とするので，本書では割愛する．

§8.10　置換に関する対称性

本章でわれわれは連続群とくに回転群や平行移動群さらに Golilei 群についてそれぞれの Lie 代数の表現を説明するのに多くのページ数を割いてきた．それは量子力学の基礎的な物理量を理解するために有用だからであった．では有限群とくに**置換群**†(permutation group)は量子力学でどのような役割を果たしているのか，それを簡単に説明することにしよう．それは一口にいえば量子力学における多体問題を実際に解く場合，相互作用が摂動として扱えるほど弱いならば，計

---

† 置換群とは後で説明する対称群の部分群のことであり，対称群自身も置換群であるため，しばしば同義に用いられる．

算の労力を著しく軽減させるだけでなく，見通しをよくする重宝な道具となりうるのである†．蛇足ながら一般5次方程式の‘代数的解法’が不可能であることを証明する等の数学の核心的問題において，置換群はまさしくkeywordであり，単なる道具ではない．

さてわれわれが本節で論じようとする多粒子系の量子力学的取扱いについて，その核心的な部分は実は角運動量の合成のところで説明してある．すなわち2つの角運動の合成というときわれわれは2個の粒子の存在を前提にしていた．何度も強調したように粒子像を量子力学的に確定するにはその粒子に関する物理量はHilbert空間で既約表現になっていなければならない．したがって2個の角運動量 $\hat{J}_1$ と $\hat{J}_2$ を合成するとは第1の粒子に附随する角運動量の既約表現 $\hat{J}_1$ と第2の粒子の同様な表現 $\hat{J}_2$ をそれぞれの粒子の表現空間 $\mathrm{H}_1, \mathrm{H}_2$ の直積空間で同時に表現したときに現れる既約表現を求めることに帰着する．

このようにいえば，1個の粒子の軌道角運動量 $\hat{L}$ とスピン $\hat{s}$ の合成はどうなのか，と反論される方があるかもしれないが，§8.5で詳しく説明したように，スピンをもつ粒子の角運動量は本来 $\hat{J}=\hat{L}+\hat{s}$ そのものを1個の粒子の物理量とすべきであって $\hat{L}$ と $\hat{s}$ を合成したものと考えるべきではない．もし合成ならばその粒子からスピンを取り去ることができるはずである．そのようなことは自然界では起こっていない．スピンのあるなしは粒子に固有の性質であって，スピンのある粒子からスピンのない粒子へ，あるいはその逆過程なるものは存在しない．念のため注意しておくが，スピンをもつ2個の粒子のスピン状態だけを交換するような相互作用は確かに存在する．しかしこれは軌道角運動の固有状態を変える相互作用と同種のものであって，スピンを奪ったり付加したりすることではない．

では多粒子系の取扱いは角運動量の合成で足りるか．もちろん否である．第1に角運動量の概念は空間の等方性，あるいは力学系の回転対称性からえられたものであって，粒子あるいは粒子系の状態を表す波動関数の角部分についての情報しか与えない．水素原子の例で学んだように，クーロン力だけを受けて運動している1個の荷電粒子のエネルギー固有状態は角運動量と無関係の主量子数 n できまる．それゆえ2つの粒子ともs状態 $(l=0)$ にあっても主量子数が異なれば明

† 量子力学への応用という立場で群論を初めて勉強しようという読者は，群の抽象的性質を学んだら精細な有限群論はとばして，直ちに連続群論に進むことができるし，むしろその方をすすめる．

らかに異なった状態にある．この場合，角運動量の合成で決定的に重要な役割を果たした既約分解(*8. 6. 4*)はそのままではほとんど意味がない．

$$\rho_0 \otimes \rho_0 = \rho_0. \qquad (8.\,10.\,1)$$

そこで多粒子系の最も簡単な場合として，スピンを持たない(あるいは無視してよい近似で)物理的には同種の2個の粒子の1つが ψ_1，他の1つが ψ_2 で表される固有状態にある系を考えてみよう．具体的にはともにs状態，1つは主量子数 n_1，他は主量子数 n_2 の状態にある系が考えられる．2粒子間の相互作用が十分弱ければ，この系の状態は $\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)$, $\psi_1(q_2)\psi_2(q_1)$ を基底とするHilbert空間の部分空間のベクトル

$$\psi(1,2) = \xi_1\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)+\xi_2\psi_1(q_2)\psi_2(q_1), \qquad \xi_1, \xi_2 \in \mathbf{C} \qquad (8.\,10.\,2)$$

で表される．ここに $q_j\,(j=1,2)$ は j 番目の粒子の空間座標，$\psi_j\,(j=1,2)$ はエネルギー E_j の固有状態で規格化してある．いうまでもなく ψ_1 と ψ_2 は直交するから $\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)$ と $\psi_1(q_2)\psi_2(q_1)$ も直交する．この系のハミルトニアンを $\hat{H}$ と書けば

$$\hat{H}\psi(1,2) = (E_1+E_2)\psi(1,2) \qquad (8.\,10.\,3)$$

は ξ_1, ξ_2 の値に無関係に成立する．ただし $\psi(1,2)$ は規格化してある．

次に座標 q_1, q_2 を置き換える演算子を $P(1\ 2)$ と表し，$\hat{H}$ がそれと可換であるとする．この条件は $\hat{H}$ のポテンシャルが $|q_1-q_2|$ の関数であるときはつねに満たされる．(物理では時に q_1-q_2 の関数であるポテンシャルが用いられることがある(本講座第1巻『古典物理学I』§3. 15の戸田格子の項参照)．その場合(*8. 10. 3*)の両辺に左から $P(1\ 2)$ を作用させることによって

$$P(1\ 2)\hat{H}P^{-1}(1\ 2)P(1\ 2)\psi(1,2) = (E_1+E_2)P(1\ 2)\psi(1,2)$$

から $P(1\ 2)\psi(1,2)=\psi(2,1)$ も同じエネルギー(E_1+E_2)の固有状態でありかつHeisenbergの方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}P(1\ 2) = [P(1\ 2), \hat{H}] = 0 \qquad (8.\,10.\,4)$$

から $P(1\ 2)$ が運動の恒量であることがわかる．

ところで $\psi(1,2)$ は，われわれが最初に選んだ基底ベクトルの空間では(*8. 10. 2*)から明らかなように2成分の複素ベクトル $\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix}$ で表される．そして(*8. 10. 2*)をよく眺めれば $P(1\ 2)$ は $\begin{bmatrix}\xi_1\\ \xi_2\end{bmatrix}$ から $\begin{bmatrix}\xi_2\\ \xi_1\end{bmatrix}$ へベクトル変換を行うことにあたる．

それは明らかに

$$P(1\ 2) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{8.10.5}$$

なる行列で表される．しかしこれは対角行列になっていない．$P(1\ 2)$ は $\hat{H}$ と可換であるから，同時に対角化できるはずである．それには，このベクトル空間の部分空間で $P(1\ 2)$ で不変なもの，この場合は不変なベクトルをまず探す．それが

$$\lambda(\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)+\psi_1(q_2)\psi_2(q_1)), \qquad \lambda\in \mathrm{C} \tag{8.10.6}$$

なることは明らかであろう．そこで新しい基底ベクトルとして

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)+\psi_1(q_2)\psi_2(q_1)) \tag{8.10.7}$$

をとろう．$1/\sqrt{2}$ は規格化のために必要．これに直交するベクトルは直ちにえられる．

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)-\psi_1(q_2)\psi_2(q_1)). \tag{8.10.8}$$

もとの基底ベクトル系から新しい基底ベクトル系への変換は(8.10.7)，(8.10.8)の式から直ちに書き下すことができて

$$Q = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \tag{8.10.9}$$

となる．したがって新しい基底ベクトル座標系(ψ_+, ψ_-)で $P(1\ 2)$ を表せば

$$Q^{-1}P(1\ 2)Q = \begin{bmatrix} 1 & \\ & -1 \end{bmatrix} \tag{8.10.10}$$

となり ψ_+, ψ_- はそれぞれ固有値 1, -1 の $P(1\ 2)$ の固有状態になっていることがわかる．

以上の説明では物理的直観がえやすいよう基底ベクトルを波動関数で具体的に書き $P(1\ 2)$ なる操作を初めから行列で表し，後でそれを対角化する，という回り路をとったが，これを 2 個の‘もの’の置き換え操作のつくる群の 2 次元複素空間における表現の問題に抽象することができる．つまり 2 個の‘もの’を数字 1, 2 で

表し，1を2に，したがって2を1に写像することを$\begin{pmatrix}1 & 2\\2 & 1\end{pmatrix}$で表し，さらに1を1に，2を2に写像する$\begin{pmatrix}1 & 2\\1 & 2\end{pmatrix}$もあわせて考えると$\left\{\begin{pmatrix}1 & 2\\1 & 2\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1 & 2\\2 & 1\end{pmatrix}\right\}$は置き換えを続けるという演算に関し確かに群になっている．これを2次の対称群S_2と呼んでいる．そこで

$$e=\begin{pmatrix}1 & 2\\1 & 2\end{pmatrix}, \qquad P(1\ 2)=\begin{pmatrix}1 & 2\\2 & 1\end{pmatrix}$$

と表せば$P^2(1\ 2)=e$であり，eの行列表現はこの場合$\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$であるから$P(1\ 2)$を対角化したものを$\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0\\0 & \lambda_2\end{bmatrix}$とすれば${\lambda_1}^2={\lambda_2}^2=1$である．これから$\lambda_1, \lambda_2=\pm 1$が直ちにえられる．$+1$の固有状態は対称，$-1$のそれは反対称だから$\psi_1, \psi_2$は直ちにえられる．また(*8. 10. 10*)からS_2の2次元表現は2つの1次元表現に既約分解されることがわかる．われわれは2個の粒子の位置座標の交換という描像に忠実な2次元の表現空間から出発し，1次元の既約表現に到達したが，実は“可換群の複素既約表現はすべて1次元である”という定理から当然予想されたことである．S_2は明らかに可換群である！　これまでの結果を角運動量の合成のところで用いたYoungの図形で表せば

$$\left.\begin{aligned}&\mathsf{H}=\mathsf{H}_+\oplus\mathsf{H}_-\\&\square\otimes\square=\square\square+\begin{matrix}\square\\[-4pt]\square\end{matrix}\end{aligned}\right\} \qquad (8.10.11)$$

となる．

つぎに3個の粒子系の簡単な場合を扱うが，その前に2個の粒子系について2個の粒子がそれぞれψ_1, ψ_2の2つの固有状態をとりうるとしたらどうなるかを調べておこう．この場合は，基底ベクトルとして$\psi_1(q_1)\psi_1(q_2)$, $\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)$, $\psi_2(q_1)\psi_1(q_2)$, $\psi_2(q_1)\psi_2(q_2)$の4個が考えられる．すなわち

$$\psi(1,2)=\xi_1\psi_1(q_1)\psi_1(q_2)+\cdots+\xi_4\psi_2(q_1)\psi_2(q_2), \qquad \xi_i\in\mathbf{C} \qquad (i=1,\cdots,4)$$

そして

$$P(1,2)=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\0 & 0 & 1 & 0\\0 & 1 & 0 & 0\\0 & 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\xrightarrow{\text{対角化}}\begin{bmatrix}1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & 1\end{bmatrix}$$

となり，対称状態として $\psi_1(q_1)\psi_1(q_2)$，$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)+\psi_2(q_1)\psi_1(q_2))$，$\psi_2(q_1)\psi_2(q_2)$，反対称状態として $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)-\psi_2(q_1)\psi_1(q_2))$ がえられる．ψ_1, ψ_2 をスピン 1/2 の固有状態 ψ_+, ψ_- とすれば，これは

$$\rho_{1/2}\otimes\rho_{1/2} = \rho_1\oplus\rho_0$$

と酷似している．読者はすでに(*8. 10. 5*)，(*8. 10. 10*)がそれぞれ Pauli 行列 σ_x, σ_z になっているのに気づいているに違いない．実際，対称群の行列表現を求めるさい Pauli 行列を利用することができる．

3 個の粒子系の最も簡単な場合は，お互いの間の相互作用を無視できる近似で，スピンをもたない同種の 3 個の粒子のうちのどれか 1 つが ψ_1，残りの 2 つのうちの 1 つが ψ_2，そして，残りの 1 つが ψ_3 なる固有状態をもつ場合である．それは $\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)\psi_3(q_3)$，$\psi_1(q_1)\psi_2(q_3)\psi_3(q_2)$，$\psi_1(q_2)\psi_2(q_1)\psi_3(q_3)$，$\psi_1(q_2)\psi_2(q_3)\psi_3(q_1)$，$\psi_1(q_3)\psi_2(q_1)\psi_3(q_2)$，$\psi_1(q_3)\psi_2(q_2)\psi_3(q_1)$ なる 6 個のエネルギー固有状態をもつ．これら 6 個のベクトルは明らかに直交している．この系の波動関数を $\psi(1,2,3)$，ハミルトニアンを H と書くと，$\psi(1,2,3)$ はそれら 6 個の基底ベクトルの 1 次結合で表されるが，結合の仕方によらず，つねに

$$\hat{H}\psi(1,2,3) = (E_1+E_2+E_3)\psi(1,2,3) \qquad (8.10.12)$$

が成り立つ．ここに $E_j\,(j=1,2,3)$ は $\hat{H}$ の固有状態 ψ_j に対応する 1 個の粒子のエネルギー固有値である．(*8. 10. 12*)はこのような 3 個の粒子系は 6 重に縮退していることを表している．そこで先に無視した粒子間の相互作用を入れれば，この縮退は何らかの形でとける(non-degenerate)はずである．

そのような計算，すなわち摂動によって非縮退化を行うことは，すでにこの系の完全系，すなわち 6 個の基底ベクトル，を具体的にえているから，原理的にはこれまで学んだ量子力学だけで十分可能である．しかし，粒子数 n が増えると，基底ベクトルの数は $n!$，したがって行列の次数も $n!$ と急増し，計算が非常に煩雑になる．そこで，あらかじめ粒子座標の置換に関する対称性を活用して，この系の固有状態を相互作用とは無関係に整理しておくと，計算が簡単になるだけでなく，物理的な見通しもよくなる．いきなり一般の n について説明する代りに，$n=3$ すなわち上にのべた 3 個の粒子系について，一般論の例示を行うことにしよう．

話をわかりやすくするために，記号を簡単化して，上にあげた 6 個の固有ベク

トルあるいは基底を $\psi_a(1)\psi_b(2)\psi_c(3)$，$\psi_a(1)\psi_b(3)\psi_c(2)$，$\psi_a(2)\psi_b(1)\psi_c(3)$，$\psi_a(2)\psi_b(3)\psi_c(1)$，$\psi_a(3)\psi_b(1)\psi_c(2)$，$\psi_a(3)\psi_b(2)\psi_c(1)$ のように表す．そうすればこれらの基底は第 1 の基底に次のような数字の置換を行うことによってえられることがわかる．

$$\left.\begin{aligned} e &= \begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ \downarrow & \downarrow & \downarrow\\ 1 & 2 & 3\end{pmatrix}, \quad p_1 = \begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ \downarrow & \downarrow & \downarrow\\ 1 & 3 & 2\end{pmatrix}, \quad p_2 = \begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ \downarrow & \downarrow & \downarrow\\ 2 & 1 & 3\end{pmatrix}, \\ p_3 &= \begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ \downarrow & \downarrow & \downarrow\\ 2 & 3 & 1\end{pmatrix}, \quad p_4 = \begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ \downarrow & \downarrow & \downarrow\\ 3 & 1 & 2\end{pmatrix}, \quad p_5 = \begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ \downarrow & \downarrow & \downarrow\\ 3 & 2 & 1\end{pmatrix} \end{aligned}\right\} \qquad (8.10.13)$$

わざわざ↓を記したのは置換は↓のみできまり横の並び方には無関係であることを明示するためである．ふつう↓を省くが，しばらく矢印を残しておく．2 つの置換の積を置換を続けて行うこと，すなわち矢印の対応を続けることで定義する．

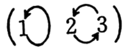
われわれは置換を演算子として扱うから置換 p_i と p_j の積はまず p_i を施して次に p_j を行うという意味で p_jp_i と書く．たとえば

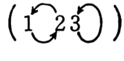
$$p_2p_1 = \begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ \downarrow & \downarrow & \downarrow\\ 1 & 3 & 2\\ \downarrow & \downarrow & \downarrow\\ 2 & 3 & 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ \downarrow & \downarrow & \downarrow\\ 2 & 3 & 1\end{pmatrix} = p_3 \qquad (8.10.14)$$

$$p_1p_2 = \begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ \downarrow & \downarrow & \downarrow\\ 2 & 1 & 3\\ \downarrow & \downarrow & \downarrow\\ 3 & 1 & 2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ \downarrow & \downarrow & \downarrow\\ 3 & 1 & 2\end{pmatrix} = p_4 \qquad (8.10.15)$$

$\{e, p_1, \cdots, p_5\}$ なる置換の集合が上に定義した積に関して 6 個の元よりなる非可換群になっていることは容易に確かめられる．この群を 3 次の**対称群**(symmetric group)と呼び S_3 で表す．S_3 の構造を調べるにはさらに次のような円環に沿う矢印を導入し，ついでに括弧記号も定義すると便利である．

$e =$  $\equiv (1)\,(2)\,(3)$　　(8.10.16)

$p_1 =$  $\equiv (1)\,(2\ \ 3) = (1)\,(3\ \ 2)$　　(8.10.17)

$p_2 =$  $\equiv (1\ \ 2)\,(3) = (3)\,(1\ \ 2) = (3)\,(2\ \ 1)$　　(8.10.18)

$$p_3=\left(\begin{smallmatrix} & 3 & \\ 1 & & 2 \end{smallmatrix}\right)\equiv(1\ 2\ 3)=(2\ 3\ 1)=(3\ 1\ 2) \tag{8.10.19}$$

$$p_4=\left(\begin{smallmatrix} & 2 & \\ 1 & & 3 \end{smallmatrix}\right)\equiv(1\ 3\ 2)=(3\ 2\ 1)=(2\ 1\ 3) \tag{8.10.20}$$

$$p_5=\left(2 \circlearrowleft \quad 1 \circlearrowleft 3\right)\equiv(2)\,(1\ 3)=(2)\,(3\ 1) \tag{8.10.21}$$

(1), (1 2), (1 2 3) などをそれぞれ1の，1と2の，1と2と3の**巡回置換**と呼んでいる．こうして S_3 のすべての元が巡回置換の積で表されることがわかった．S_n についても帰納法を使って簡単に証明される．巡回置換については次の性質が重要である．

$$(i,j)^2=(i)(j)\quad(i\neq j),\qquad (i,j,k)^3=(i)(j)(k)\quad(i\neq j\neq k\neq i)$$

さていよいよもとの6次元ベクトル空間 V_6 を S_3 に関していくつかの不変部分空間の直和に分解することを試みよう．まずつぎのベクトル集合

$$V_1=\{\boldsymbol{x}:\ \boldsymbol{x}=\lambda(e+p_1+p_2+p_3+p_4+p_5)\,\psi(1,2,3),\ \ \lambda\in \mathrm{C}\} \tag{8.10.22}$$

が1次元の不変部分空間になっていることは明らかである．つぎに V_1 と直交する3次元空間

$$V_3=\left\{\boldsymbol{y}:\ \boldsymbol{y}=\left(\lambda p_1+\mu p_5+\nu p_2-\frac{1}{3}(\lambda+\mu+\nu)(e+p_3+p_4)\right)\psi(1,2,3),\ \ \lambda,\mu,\nu\in \mathrm{C}\right\} \tag{8.10.23}$$

を考えるとこれが S_3 に関してやはり不変部分空間になっている．これは直接計算によってたしかめることができる．たとえば

$$\begin{aligned} p_1\boldsymbol{y}&=p_1\left(\lambda p_1+\mu p_5+\nu p_2-\frac{1}{3}(\lambda+\mu+\nu)(e+p_3+p_4)\right)p_1{}^{-1}p_1\psi(1,2,3)\\ &=\left(\lambda p_1+\nu p_5+\mu p_2-\frac{1}{3}(\lambda+\mu+\nu)(e+p_3+p_4)\right)p_1\psi(1,2,3)\in V_3 \end{aligned} \tag{8.10.24}$$

したがって残りの不変部分空間は当然2次元のベクトル空間 V_2 になる．こうして V_6 が V_1, V_3 および V_2 の直和に分解できることがわかったが，これはまだ既約分解になっていない．実際 V_3 の中から

$$V_1' = \{y:\ y=\lambda(p_1+p_5+p_2-e-p_3-p_4)\psi(1,2,3),\ \lambda\in\mathbf{C}\}\subset V_3 \qquad (8.10.25)$$

をとり出せば，これがやはり不変部分空間になっていることも容易に知られる．従って V_3 の残りの部分は2次元の不変部分空間 V_2' になる．V_2' や V_2 はもはや1次元の不変部分空間には分解できない．もし出来たとすれば S_3 のすべての元を対角化したことになり，S_3 が可換群ではないことと矛盾する．結局，V_6 の既約分解は図8.3のようになる．S_3 の場合はその2次元の既約表現を求めることは初等的な計算で可能である．それは読者の演習に残しておこう([彌永，杉浦] p. 166 に懇切な説明がある)．

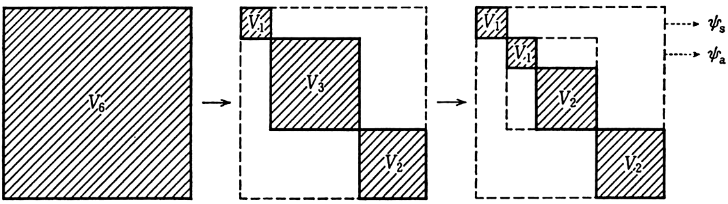


図8.3　V_6 の既約分解

われわれにとって当面関心があるのは既約表現の行列そのものではなく，既約分解したときの固有ベクトル，すなわちこの粒子系の状態の対称性に関する性質である．V_1, V_1' の固有ベクトルをそれぞれ ψ_s, ψ_a と書くことにすれば(8.10.22), (8.10.25) より

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{6}}(e+p_1+p_2+p_3+p_4+p_5)\psi(1,2,3) \qquad (8.10.26)$$

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{6}}(-e-p_1+p_2-p_3-p_4+p_5)\psi(1,2,3) \qquad (8.10.27)$$

と表され ψ_s と ψ_a が直交していることはいうまでもないが，直接計算によって

$$(1\ 2)\psi_s = \psi_s, \quad (1\ 3)\psi_s = \psi_s, \quad (2\ 3)\psi_s = \psi_s \qquad (8.10.28)$$

$$(1\ 2)\psi_a = -\psi_a, \quad (1\ 3)\psi_a = -\psi_a, \quad (2\ 3)\psi_a = -\psi_a \qquad (8.10.29)$$

なる著しい性質を見い出すことができる．これは ψ_s がどの2つの粒子の互換によっても不変，また ψ_a はどの2つの粒子の互換によっても符号を変えることを示している．$\psi(1,2,3)=\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)\psi_3(q_3)$ とすれば

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{6}}(\psi_1(q_1)\psi_2(q_2)\psi_3(q_3) + \psi_1(q_1)\psi_2(q_3)\psi_3(q_2) + \cdots$$
$$+ \psi_1(q_3)\psi_2(q_2)\psi_3(q_1)) \qquad (8.10.30)$$

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{vmatrix} \psi_1(q_1) & \psi_1(q_2) & \psi_1(q_3) \\ \psi_2(q_1) & \psi_2(q_2) & \psi_2(q_3) \\ \psi_3(q_1) & \psi_3(q_2) & \psi_3(q_3) \end{vmatrix} \qquad (8.10.31)$$

と表される.

われわれは多粒子系の状態を粒子の置換に関する対称性で分類整理することを見やすくするため，粒子の空間座標 q_i の交換を扱ってきた．しかし歴史的には原子スペクトルの解析のため多電子系を量子力学的に解くさい Pauli 原理の定式化として q_i に i 番目の電子のスピン座標を含めた(8.10.31)が Slater によって提案された．それゆえ q_i がスピン座標を含む場合の(8.10.31)のことを Slater 行列と呼んでいる．いま述べたように多粒子系を物理的に扱おうとすれば，統計の問題に立ち入らざるをえない．この問題は第9章で扱われる.

本節では対称群 S_2 および S_3 について量子力学で必要な情報を実験的手法，すなわち実際に験してみる方法で抽き出したが，最後に一般の S_n について既約分解を求める方法を説明しておこう．証明はたとえば[彌永，杉浦] p. p. 176-242 を参照されたい.

(i) S_n の元を共通の数字を含まない巡回置換の積で表す．各巡回置換が含む文字の数を m_i とすれば明らかに

$$m_1 + m_2 + \cdots + m_r = n. \qquad (8.10.32)$$

そこで

$$m_1 \geqq m_2 \geqq \cdots \geqq m_r \geqq 0 \qquad (8.10.33)$$

として，n 個の小正方形を図8.4のように並べる．このような図形は，すでに角運動量の合成のところで Young の図形として用いた．Young の図形が同じならば，それに相当する S_n の元は同じ類 (class) C に属する．その意味は

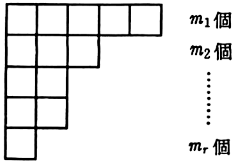


図8.4

$$\pi \in C \Longrightarrow q\pi q^{-1} \in C, \qquad \forall q \in S_n. \tag{8.10.34}$$

類の数は明らかに不定方程式(8. 10. 32), (8. 10. 33)の整数解の個数に等しく，これが S_n の既約表現の数を与える.

(ii) 各既約表現の次元数は，その Young の図形に，次のような約束で数字 $1, 2, \cdots, n$ を入れる方法の数に等しい：

(a) 各行の数字は左から右へ小さい順

(b) 各列の数字は上から下へ小さい順

にそれぞれ並ぶようにする.

(iii) 各既約表現の次元数の 2 乗の和は $n!$ に等しい．これは検算に役立つ.

例 1　S_2: $\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline\end{array}$,　$\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline\end{array}$

次元数 (1)　(1)　　$1^2+1^2=2!$

例 2　S_3: $\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline\end{array}$,　$\underbrace{\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}\quad\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}}_{(2)}$,　$\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline\end{array}$

(1)　(2)　(1)　　$1^2+2^2+1^2=3!$

例 3　S_4: $\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 3\\\hline 4\\\hline\end{array}$,　$\underbrace{\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3\\\cline{1-1} 4\\\cline{1-1}\end{array}\quad\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2\\\cline{1-1} 4\\\cline{1-1}\end{array}\quad\begin{array}{|c|c|}\hline 1&4\\\hline 2\\\cline{1-1} 3\\\cline{1-1}\end{array}}_{(3)}$,　$\underbrace{\begin{array}{|c|c|}\hline 1&2\\\hline 3&4\\\hline\end{array}\quad\begin{array}{|c|c|}\hline 1&3\\\hline 2&4\\\hline\end{array}}_{(2)}$,

(1)　(3)　(2)

$\underbrace{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&3\\\hline 4\\\cline{1-1}\end{array}\quad\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&3&4\\\hline 2\\\cline{1-1}\end{array}\quad\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&2&4\\\hline 3\\\cline{1-1}\end{array}}_{(3)}$,　$\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline 1&2&3&4\\\hline\end{array}$

(3)　(1)

$1^2+3^2+2^2+3^2+1^2=4!$

第Ⅳ部　多粒子系と場

第9章　多粒子系の量子力学

§9.1　同種粒子系の状態空間

a)　同種粒子系の波動関数

多数の同種粒子からなる系を考える．ここではまず2粒子系の場合の延長として，N粒子系の運動を記述する方式に着目する．粒子間相互作用の性質に関係するような力学的な性質は後で考察する．この系の状態を記述する空間は，1粒子の状態を記述する空間 R の N 個の積空間 R^N である．粒子 i の運動を記述する変数を $\boldsymbol{X}_i$ とすると（$\boldsymbol{X}$ としては配位空間の座標をとる．位置座標 $\boldsymbol{x}$ およびスピン変数等があればそれらを含めて座標とするのが普通である），N粒子系の波動関数は一般に $\Psi(\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \cdots, \boldsymbol{X}_N)$ の形に書ける．1粒子空間 R が完全系 $\{\varphi_i(\boldsymbol{X})\}$ で張られるならば，すなわち，R の関数が $\varphi_i(\boldsymbol{X})(i=1, 2, \cdots)$ の線形結合で表されるなら，$\Psi(\boldsymbol{X}_1, \boldsymbol{X}_2, \cdots, \boldsymbol{X}_N)$ は完全系 $\{\varphi_{\alpha_1}(\boldsymbol{X}_1)\varphi_{\alpha_2}(\boldsymbol{X}_2)\cdots\varphi_{\alpha_N}(\boldsymbol{X}_N)\}$ で展開できる．ここで α_1, $\alpha_2, \cdots, \alpha_N$ は，1, 2, … のどれかである．すなわち，$\{\varphi_{\alpha_1}(\boldsymbol{X}_1)\varphi_{\alpha_2}(\boldsymbol{X}_2)\cdots\varphi_{\alpha_N}(\boldsymbol{X}_N)\}$ で R^N が張られる．関数系 $\{\varphi_i\}$ としては，完全系であれば何でもよいわけであるが，物理的な状況に対応させるため，1粒子運動の適当なハミルトニアン H_0 の固有直交関数系を取るのがふつうである：

$$H_0(\boldsymbol{X}_i)\varphi_{\alpha_i}(\boldsymbol{X}_i) = \varepsilon_{\alpha_i}\varphi_{\alpha_i}(\boldsymbol{X}_i). \qquad (9.1.1)$$

N粒子系のハミルトニアン H は，一般に，1粒子運動のハミルトニアンの和と粒子間相互作用ハミルトニアンとの和で書ける：

$$H = \sum_{i=1}^{N} H_0(\boldsymbol{X}_i) + H_{\mathrm{I}}(\boldsymbol{X}_1, \cdots, \boldsymbol{X}_N). \qquad (9.1.2)$$

この H_0 を(9.1.1)の H_0 として用いると便利である．

ここで，系を構成する粒子が同種類のものであることを考慮に入れることにする．2粒子系において，2粒子が同種（または同一）である場合，粒子1が状態 A

にあり粒子2が状態Bにあるということと，粒子2が状態Aにあり粒子1が状態Bにあるということとは，物理的に識別できない．それは，われわれが粒子を識別するのは，その粒子のもつ属性のちがいによるのであるが，同種粒子とは，いわば同じ顔をしていて，状態のちがいによる以外に区別ができないからである．このことを同種粒子の多粒子系に拡張して考える．仮りに粒子に番号をつけて，ある状態を設定したとしても，その状態と粒子の番号をつけかえた状態とは物理的には同一である．たとえば，粒子1が状態α_1，粒子2が状態α_2，…，粒子Nが状態α_Nにあるということと，粒子i_1が状態α_1，粒子i_2が状態α_2，…，粒子i_Nが状態α_Nにあるということとは物理的に区別できない．こういう事情は量子力学でどのように表現されるであろうか．

同種粒子の物理系が構成粒子の番号をつけかえても同一であるということは，物理量が粒子番号の入れかえに対して不変であることを意味する．たとえば，2体相互作用を通じて作用し合っているN個の同種粒子系では，ハミルトニアンは

$$H=\sum_{i=1}^{N}\left(\frac{{p_i}^2}{2m}+U(x_i)\right)+\frac{1}{2}\sum_{i,j}V(x_i,x_j) \qquad (9.1.3)$$

と書けるが，これは明らかに粒子番号をつけかえても不変である．

このハミルトニアンの1つの固有関数を$\Psi(x_1,x_2,\cdots,x_N)$とすると，ここで座標の粒子番号のつけかえ$(1,2,\cdots,N)\to(i_1,i_2,\cdots,i_N)$を行って得られる関数$\Psi(x_{i_1},x_{i_2},\cdots,x_{i_N})$は，$H$がこのつけかえに対して不変だから，やはり$H$の同じ固有値に属する固有関数である．$N$個の粒子の入れかえは$N!$通りあるから，1つの固有値に対し，他の理由による縮退を考えなければ，$N!$個の固有関数が作られることになる．この$N!$個の関数で張られる空間を考えると，この空間の中の関数は粒子番号の入れかえという操作に対してこの空間の中で変換される．N個の番号の入れかえという操作，すなわちN個の文字の置換，は群を作る．これはN次の対称群である．そこで，上に考えた空間はこの群の表現空間になっている．このことをもう少し一般的にいえば次のようになる．

N個の文字の置換をPとする．上の例では$(1,2,\cdots,N)\to(i_1,i_2,\cdots,i_N)$である．この置換の全体が$N$次の対称群を作っている．いま座標$x_1,x_2,\cdots,x_N$についてその添字（粒子番号）にこの置換を施す：$(x_1,\cdots,x_N)\to(x_{i_1},\cdots,x_{i_N})=P(x_1,\cdots,x_N)$．$x_1,\cdots,x_N$の関数$\Psi(x_1,\cdots,x_N)$はこの操作によって一般に関数形が変化す

る：$\Psi\to\Psi'$. この変換を $\Psi'(x)=\Psi(Px)$ で定義し，$\Psi\to\Psi'$ の変換を U_P と書く：$\Psi'=U_P\Psi$. この変換の性質から $\|\Psi\|$ は変換によって変わらない．すなわち，U_P はユニタリー変換であり，Ψ 空間での変換は対称群のユニタリー表現になっていることを示すことができる．次に，この座標 x_i が，N 個の同種粒子の系の中の粒子 i の座標であるとし，この系に関係する物理量 A を考える．同種粒子系で粒子番号をつけかえても物理的状況は変わらない，あるいは，われわれがそれを区別できない，ということに対応して

$$\langle\Psi|A|\Psi\rangle=\langle\Psi'|A|\Psi'\rangle$$

であると要請してよい．

$$\langle\Psi'|A|\Psi'\rangle=\langle U_P\Psi|A|U_P\Psi\rangle=\langle\Psi|U_P{}^{-1}AU_P|\Psi\rangle$$

であるから，置換 P による演算子 A の変換は

$$A\longrightarrow U_P{}^{-1}AU_P$$

であり，上の要請は

$$A=U_P{}^{-1}AU_P \quad あるいは \quad U_PA=AU_P$$

ということである．前の例では A として H を取っている．

U_P の集合は対称群の表現になっているが，必ずしも既約な表現であるとは限らない．上に作った Ψ(およびそれから作られる $U_P\Psi$ の全体)の空間は，対称群の既約表現に従って分解される．対称群の既約表現の中で，群の次数に関係なく現れるものとして，対称表現および反対称表現がある．これはともに 1 次元表現であり，対称表現は，すべての置換に対して $U_P=1$ であり，反対称表現は，置換が偶置換なら $U_P=1$，奇置換なら $U_P=-1$ となるようなものである．すなわち，この 2 つの表現の基底をそれぞれ $\Psi_S(x_1,\cdots,x_N)$，$\Psi_A(x_1,\cdots,x_N)$ とすれば，

$$\left.\begin{array}{c}\Psi_S(Px_i)=\Psi_S(x_i),\qquad \Psi_A(Px_i)=\delta_P\Psi_A(x_i)\\ (\delta_P \text{ は置換 } P \text{ の偶奇に応じて } +1 \text{ または } -1)\end{array}\right\}\tag{9.1.4}$$

である．Ψ_S, Ψ_A は $\Psi(x)$ から

$$\left.\begin{aligned}\Psi_S&=\mathscr{S}\Psi\equiv\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P U_P\Psi(x_1,\cdots,x_N)\\ \Psi_A&=\mathscr{A}\Psi\equiv\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P \delta_PU_P\Psi(x_1,\cdots,x_N)\end{aligned}\right\}\tag{9.1.5}$$

で作ることができる．

同種粒子系で粒子の番号を区別することが物理的に意味がないということは，粒子の番号を入れかえても物理的に識別できないということである．物理的に識別できない同じものであるから，その系の物理的状態に対応する状態ベクトルあるいは波動関数は1つしかない，と考えるならば，その波動関数は上の Ψ_{S} か Ψ_{A} のどちらかの形のものでしかあり得ないことになる．これは量子力学に特有のことである．古典力学では，同種類の粒子であっても個々の粒子の運動を追跡することができるから，たとえば粒子1が運動状態 A にあり粒子2が運動状態 B にあることと，粒子1が運動状態 B にあり粒子2が運動状態 A にあることを識別することができる．これに反し，量子力学では観測によってこれを識別することはできない．したがって，状態のこのような意味での縮退を解くことはできない．

b）Pauli 原理，統計

さて，上に定義した操作 $\mathscr{S}$ あるいは $\mathscr{A}$ に際して用いられた Ψ は，N 粒子系空間の波動関数であるが，N 粒子系の固有状態である必要はない．むしろ，N 粒子系空間の基底として便利なものを選べばよい．Ψ として(*9. 1. 1*)の φ を用いて1粒子状態の積

$$\Psi^{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N}(X_1, X_2, \cdots, X_N)=\varphi_{\alpha_1}(X_1)\varphi_{\alpha_2}(X_2)\cdots\varphi_{\alpha_N}(X_N) \qquad (9.\,1.\,6)$$

をとると，Ψ_{A} は

$$\Psi_{\mathrm{A}}{}^{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N}(X_1, \cdots, X_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \varphi_{\alpha_1}(X_1) & \varphi_{\alpha_1}(X_2) & \cdots & \varphi_{\alpha_1}(X_N) \\ \varphi_{\alpha_2}(X_1) & \varphi_{\alpha_2}(X_2) & \cdots & \varphi_{\alpha_2}(X_N) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \varphi_{\alpha_N}(X_1) & \varphi_{\alpha_N}(X_2) & \cdots & \varphi_{\alpha_N}(X_N) \end{vmatrix} \qquad (9.\,1.\,7)$$

である．これを Slater 行列といっている．

この形からもすぐに判るように，1粒子状態 $\alpha_1, \cdots, \alpha_N$ の中に同じものがあれば $\Psi_{\mathrm{A}}=0$ となる．すなわち，この場合には，2個以上の粒子が同一状態を占めることはなく，1つの状態は1個の粒子でしか占められない．このような性質を持った粒子を **Fermi 粒子**といい，この性質を **Pauli 原理**または Pauli の排他律という．

これに対し，Ψ_{S} は

$$\Psi_{\mathrm{S}}{}^{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N}(X_1, \cdots, X_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_P U_P(\varphi_{\alpha_1}(X_1)\varphi_{\alpha_2}(X_2)\cdots\varphi_{\alpha_N}(X_N)) \qquad (9.\,1.\,8)$$

であり，明らかにこの時には $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_N$ の中に相等しいものがあっても $\Psi_S \neq 0$ である．すなわち，1つの1粒子状態を何個の粒子が占めてもかまわない．粒子系の状態を表す波動関数が Ψ_S のような対称性をもっているような粒子を **Bose 粒子**という．

(*9. 1. 8*)では，1粒子状態 α_i の中に同じものがいくつもありうる．そこで，Bose 粒子系の場合には，各粒子状態を何個の粒子が占めているか，という形で系の状態を表すことができる．1粒子状態に番号をつけ(たとえばエネルギーの低い方から順につける)，状態1は n_1 個の粒子で，状態2は n_2 個の粒子で，…，状態 i は n_i 個の粒子で占められているとする．すなわち，(*9. 1. 8*)の $\alpha_1, \cdots, \alpha_N$ の中で $\alpha=1$ であるものの数が n_1 個，$\alpha=2$ であるものの数が n_2 個，…，$\alpha=i$ であるものの数が n_i 個あるとする．$n_i \geqq 0$ $(i=1, 2, \cdots)$ であり，全系の粒子数は N であるから $\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N$ である．系の状態は $(n_1, n_2, \cdots)$ という状態配位で定められる．この時

$$\Psi(X_1, \cdots, X_N) = \underbrace{\varphi_1(X_1)\cdots\varphi_1(X_{n_1})}_{n_1 \text{個}}\underbrace{\varphi_2(X_{n_1+1})\cdots\varphi_2(X_{n_1+n_2})}_{n_2 \text{個}}\cdots \quad (9.\ 1.\ 9)$$

であり，これから(*9. 1. 8*)の操作を施した Ψ_S は明らかに規格化されていない．そこで，(*9. 1. 9*)から出発し，規格化された波動関数を

$$\Psi_S^{n_1 n_2 \cdots}(X_1, \cdots, X_N) = C(n_1, n_2, \cdots)\sum_P U_P \Psi(X_1, \cdots, X_N) \quad (9.\ 1.\ 10\ a)$$

で作る．C は規格化定数である．(*9. 1. 10 a*)の右辺の $\sum$ の和の数は $N!$ である．ところで，たとえば $n_1 \neq 0$ であると，置換 P の中で1から n_1 までの文字を入れかえるような置換は Ψ の形を変えない．同様に，$n_2 \neq 0$ とし，$n_1+1, \cdots, n_1+n_2$ の文字を入れかえても Ψ の形は変わらない．このような，Ψ の形を変えない置換は全部で $n_1!n_2!\cdots$ 個ある．したがって，(*9. 1. 10 a*)はまた

$$\Psi_S^{n_1 n_2 \cdots}(X_1, \cdots, X_N) = C'(n_1, n_2, \cdots)\sum_{P'}{}' U_{P'} \Psi(X_1, \cdots, X_N) \quad (9.\ 1.\ 10\ b)$$

とも書ける．$U_{P'}$ は，Ψ の形を変えるような変換だけを考えたものである．Ψ の形を変えない置換とは $(1, \cdots, n_1)$, $(n_1+1, \cdots, n_1+n_2)$, … のそれぞれの中でのみ文字を置きかえるような置換である．これは置換 P の群の中で部分群をつくる．P' は，この部分群を法とした剰余群に属する置換で，$\sum'$ はそれについての和である．$\sum'$ の和の数は明らかに $N!/(n_1!n_2!\cdots)$ であるから

$$C'(n_1, n_2, \cdots) = \sqrt{\frac{n_1!n_2!\cdots}{N!}} \tag{9.1.11}$$

である($\sum'$の和に含まれる各項は互いに直交する)．これに対し，(9.1.8)の$\sum$の各項には同じものが$n_1!n_2!\cdots$個あるから，Cの方は

$$C(n_1, n_2, \cdots) = \frac{1}{\sqrt{N!n_1!n_2!\cdots}} \tag{9.1.12}$$

である．

c) 占有数表示

1粒子状態の完全系$\{\varphi_i\}$を決めておくと，Ψ_S, Ψ_Aは，各1粒子状態を何個の粒子が占めるかで定められる．すなわち，$(n_1, n_2, \cdots)$の組で定められる．Fermi粒子系の場合は，n_iは1または0である．全系の粒子数がNであれば$\sum_i n_i = N$である．すでに述べたように，N粒子系においては$\left\{\prod_{i=1}^{N} \varphi_{\alpha_i}(x_i)\right\}$で状態空間を張ることができるから，$\Psi_S{}^{n_1n_2\cdots}$または$\Psi_A{}^{n_1n_2\cdots}$で記述される状態を

$$|n_1, n_2, \cdots\rangle \tag{9.1.13}$$

と表せば，これをN粒子系の状態の基底ベクトルとして採用することができる．$\{\varphi_i\}$が完全直交系になっていれば，$|n_1, n_2, \cdots\rangle$は

$$\langle n_1', n_2', \cdots|n_1, n_2, \cdots\rangle = \delta_{n_1n_1'}\delta_{n_2n_2'}\cdots \tag{9.1.14}$$

という性質を持ち，直交系である．N粒子系の状態$|\Psi(1, 2, \cdots, N)\rangle$は$|n_1, n_2, \cdots\rangle$の線形結合として表すことができる：

$$\begin{aligned}|\Psi(1, 2, \cdots, N)\rangle &= \sum_{(n_i)} A_{n_1n_2\cdots}|n_1, n_2, \cdots\rangle \\ &= \sum_{(n_i)} \langle n_1, n_2, \cdots|\Psi\rangle|n_1, n_2, \cdots\rangle.\end{aligned} \tag{9.1.15}$$

このような表現は，1粒子状態を占める粒子数の組で系の状態を表すので，**占有数表示**ということもある．

これまでは粒子数Nを定めて話をしている．しかし，占有数表示での表し方は，どのNに対しても通用する．$|n_1, n_2, \cdots\rangle$は$\sum n_i$の値に応じた粒子数を持つ系の基底であると見なすことができる(もちろん，その場合の波動関数すなわち座標表示は粒子数に応じたものを作ることになる)．状態空間を拡張して，1粒子系空間，2粒子系空間，3粒子系空間，…のすべての和空間を考えると，$\sum_i n_i = N$であるような$|n_1, n_2, \cdots\rangle$はその中の部分空間であるN粒子空間の状態を与えている．このようにして，占有数表示での基底をとれば，系の粒子数を陽に含まない

形で，あるいはどの粒子数にも適用できる形で，議論を進めることができる．粒子数が変化するような現象を扱う場合，あるいは系の粒子数に関係しない一般的性質を取り扱う場合などには有用である．

最後に，N 粒子系の波動関数と $(N-1)$ 粒子系の波動関数との関係を見ておこう．まず，**Bose 粒子系**の場合には，(*9. 1. 10 b*) および (*9. 1. 11*) からわかるように

$$\Psi_{\mathrm{S}}{}^{n_1n_2\cdots}(X_1, X_2, \cdots, X_N) = \sum_{i=1}^{\infty}\sqrt{\frac{n_i}{N}}\varphi_i(X_1)\,\Psi_{\mathrm{S}}{}^{n_1n_2\cdots n_i-1\cdots}(X_2, \cdots, X_N) \tag{9.1.16}$$

あるいは (*9. 1. 12*) から

$$\Psi_{\mathrm{S}}{}^{n_1n_2\cdots}(X_1, X_2, \cdots, X_N) = \sum_{k=1}^{N}\frac{1}{\sqrt{n_iN}}\varphi_i(X_k)\,\Psi_{\mathrm{S}}{}^{n_1\cdots n_i-1\cdots}(X_1, \cdots, X_{k-1}, X_{k+1}, \cdots, X_N) \tag{9.1.17}$$

である．

Fermi 粒子系の場合には $n_i=1$ または 0 であるから，(*9. 1. 7*) の α は $n_i=1$ であるような状態 i だけを取っている．占められている状態について，番号の小さい方から順に並べて $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_N$ とすると約束しておく．(*9. 1. 7*) は行列式であるから，これを第 1 列で展開すると

$$\Psi_{\mathrm{A}}{}^{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N}(X_1, X_2, \cdots, X_N) = \sum_{m=1}^{N}\frac{1}{\sqrt{N}}(-1)^{m}\varphi_{\alpha_m}(X_1)\,\Psi^{\alpha_1\cdots\alpha_{m-1}\alpha_{m+1}\cdots\alpha_N}(X_2, \cdots, X_N)$$

である．これを $(n_1, n_2, \cdots)$ を使った形に書くために

$$\sum(i, j) = \sum_{k=i}^{j} n_k \tag{9.1.18}$$

という量を定義する．$\alpha_m=i$ の時に $m=\sum(1, i)$ であるから，$\Psi_{\mathrm{A}}{}^{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N}$ を $\Psi_{\mathrm{A}}{}^{n_1, n_2, \cdots}$ $(n_{\alpha_i}=1,\ i=1, 2, \cdots, N,$ それ以外の $n_i=0)$ と書いて

$$\Psi_{\mathrm{A}}{}^{n_1n_2\cdots}(X_1, \cdots, X_N) = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{\infty}\varphi_i(X_1)n_i(-1)^{\Sigma(1, i-1)}\Psi_{\mathrm{A}}{}^{n_1\cdots n_i-1\cdots}(X_2, \cdots, X_N) \tag{9.1.19}$$

である．あるいは，(*9. 1. 7*) を第 k 行で展開して

$$\Psi_{\mathrm{A}}{}^{n_1n_2\cdots}(X_1, \cdots, X_N)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{l=1}^{N}\varphi_{\alpha_k}(X_l)(-1)^{l-1}\Psi_{\mathrm{A}}{}^{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_{k-1}\alpha_{k+1}\cdots\alpha_N}(X_1, \cdots, X_{l-1}, X_{l+1}, \cdots, X_N)$$

であるから，右辺の Ψ を $\Psi^{n_1n_2\cdots}$ の形で書いて

$$\Psi_{\mathrm{A}}{}^{n_1n_2\cdots}(X_1, \cdots, X_N)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{l=1}^{N}\varphi_i(X_l)(-1)^{l-1}\Psi_{\mathrm{A}}{}^{n_1n_2\cdots n_i-1\cdots}(X_1, \cdots, X_{l-1}, X_{l+1}, \cdots, X_N) \tag{9.1.20}$$

である．ただし右辺の i は $(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_N)$ の中のどれかの値をとる(すなわち，$n_i \neq 0$ であるような i である)．

§9.2　第2量子化

a)　多粒子系における物理量の行列要素

前節で述べたような表現では物理量の行列要素はどういう形に書けるであろうか．まず，1個の粒子座標にだけ関係する量を考える．$V(X_i)$ という形の量である．たとえば，粒子に作用する外力のポテンシャルなどがそうである．このような形の量は1粒子座標にだけ作用するので，1粒子演算子といわれる．いま考えている系は同種粒子系であるから，粒子の同種性からこのような量は

$$V^{(1)} = \sum_{i=1}^{N} v^{(1)}(X_i) \tag{9.2.1}$$

という形をとっている．1粒子演算子は1粒子座標だけに作用するから，1つの1粒子状態を変化させるような行列要素を持つが，1度に複数個の粒子状態を変えることはない．$V^{(1)}$ によって粒子状態が α_l から α_m に変化するような行列要素を考える($l=m$ であってもよい)．前節の表現でいえば，最初の状態に対し n_{α_l} が1つ減少し n_{α_m} が1つ増加した状態への行列要素を考えることになる．すなわち

$$\langle\cdots, n_{\alpha_l}-1, \cdots, n_{\alpha_m}+1, \cdots|V^{(1)}|\cdots, n_{\alpha_l}, \cdots, n_{\alpha_m}, \cdots\rangle \tag{9.2.2}$$

を考える．$l=m$ の場合は $\langle\cdots, n_{\alpha_l}, \cdots, n_{\alpha_m}, \cdots|V^{(1)}|\cdots, n_{\alpha_l}, \cdots, n_{\alpha_m}, \cdots\rangle$ であることはいうまでもない．1粒子演算子ではこれ以外の行列要素はない．

2粒子の座標に関係する演算子，たとえば粒子間の力のポテンシャルなどは2粒子演算子と呼ばれる．粒子の同種性から，2粒子演算子は

$$V^{(2)} = \sum_{i,j} v^{(2)}(X_i, X_j) \tag{9.2.3}$$

の形に書ける．この時は，2個の粒子状態の変化に対応する行列要素

$$\langle \cdots, n_{\alpha_k}-1, \cdots, n_{\alpha_l}-1, \cdots, n_{\alpha_m}+1, \cdots, n_{\alpha_n}+1, \cdots | V^{(2)} | \cdots, n_{\alpha_k}, \cdots, n_{\alpha_l}, \cdots, n_{\alpha_m}, \cdots, n_{\alpha_n}, \cdots \rangle \tag{9.2.4}$$

を考えればよい．

Bose 粒子の場合　まず Bose 粒子系について 1 粒子演算子(*9. 2. 1*)の行列要素(*9. 2. 2*)を求めよう．波動関数は(*9. 1. 10 a*)である．

$$\begin{aligned}
&\langle \cdots, n_{\alpha_l}-1, \cdots, n_{\alpha_m}+1, \cdots | V^{(1)} | \cdots, n_{\alpha_l}, \cdots, n_{\alpha_m}, \cdots \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{N! n_{\alpha_1}! \cdots (n_{\alpha_l}-1)! \cdots (n_{\alpha_m}+1)! \cdots}} \frac{1}{\sqrt{N! n_{\alpha_1}! \cdots n_{\alpha_l}! \cdots n_{\alpha_m}! \cdots}} \\
&\quad \cdot \sum_{P_1} \sum_{P_2} \int U_{P_2} \{ \varphi_{\alpha_1}{}^*(X_1) \cdots \varphi_{\alpha_1}{}^*(X_{n_{\alpha_1}}) \cdots \overbrace{\varphi_{\alpha_l}{}^*(X_k) \cdots \varphi_{\alpha_l}{}^*(X_{k+n_{\alpha_l}-1})}^{n_{\alpha_l}-1\text{ 個}} \\
&\quad\quad \cdots \overbrace{\varphi_{\alpha_m}{}^*(X_j) \cdots \varphi_{\alpha_m}{}^*(X_{j+n_{\alpha_m}+1})}^{n_{\alpha_m}+1\text{ 個}} \cdots \} \cdot \left(\sum_{i=1}^{N} v^{(1)}(X_i) \right) \\
&\quad \cdot U_{P_1} \{ \varphi_{\alpha_1}(X_1) \cdots \varphi_{\alpha_1}(X_{n_{\alpha_1}}) \cdots \varphi_{\alpha_l}(X_k) \cdots \varphi(X_{k+n_{\alpha_l}}) \\
&\quad\quad \cdots \varphi_{\alpha_m}(X_{j+1}) \cdots \varphi_{\alpha_m}(X_{j+n_{\alpha_m}+1}) \cdots \} \cdot \prod_{i=1}^{N} dX_i \\
&= \frac{1}{N! n_{\alpha_1}! \cdots n_{\alpha_l}! \cdots n_{\alpha_m}! \cdots} \sqrt{\frac{n_{\alpha_l}}{n_{\alpha_m}+1}} N! n_{\alpha_1}! \cdots n_{\alpha_l}! \cdots (n_{\alpha_m}+1)! \cdots \\
&\quad \cdot \int \varphi_{\alpha_m}{}^*(X_j) v^{(1)}(X_j) \varphi_{\alpha_l}(X_j) dX_j \\
&= \sqrt{n_{\alpha_l}(n_{\alpha_m}+1)}\, v_{\alpha_m \alpha_l}{}^{(1)}
\end{aligned}$$

ただし

$$v_{ij}{}^{(1)} = \int \varphi_i{}^*(X) v^{(1)}(X) \varphi_j(X) dX \tag{9.2.5}$$

である．上の行列要素をもっと対称的な形に書くために n_{α_m} をあらためて $n_{\alpha_m}-1$ とおくと

$$\langle \cdots, n_{\alpha_l}-1, \cdots, n_{\alpha_m}, \cdots, n_{\alpha_N} | V^{(1)} | \cdots, n_{\alpha_l}, \cdots, n_{\alpha_m}-1, \cdots, n_{\alpha_N} \rangle = \sqrt{n_{\alpha_l} n_{\alpha_m}}\, v_{\alpha_m \alpha_l}{}^{(1)} \tag{9.2.6}$$

もっと一般的な形で書けば

$$\langle \cdots, n_i-1, \cdots, n_j, \cdots | V^{(1)} | \cdots, n_i, \cdots, n_j-1, \cdots \rangle = \sqrt{n_i n_j}\, v_{ji}{}^{(1)} \tag{9.2.7}$$

である．また，対角要素は明らかに

$$\langle n_1, n_2, \cdots | V^{(1)} | n_1, n_2, \cdots \rangle = \sum_i n_i v_{ii}^{(1)} = \sum_i \sqrt{n_i n_i} v_{ii}^{(1)} \quad (9.2.8)$$

である.

Fermi粒子の場合 この時は, 波動関数は(9.1.7)である. 1粒子状態が$i \to j$と変化することに対応する$V^{(1)}$の行列要素を求める. $i<j$であるとし($i>j$の場合も結果としては同じである), 系の初期状態で占められている粒子状態を$\alpha_1, \alpha_2, \cdots$と並べる. iはこのαのどれかである. $i=\alpha_l$とする. 系はFermi粒子系であるから, すでに占められている粒子状態へは粒子は移れない. すなわち, jは始めに考えた$\{\alpha\}$の中にはない. jと$\{\alpha\}$とを併せてあらためて大きさの順に並べると, $(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_{m-1}, j, \alpha_m, \cdots, \alpha_N)$となったとする. これを$(\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_{m-1}, \beta_m(=j), \beta_{m+1}(=\alpha_m), \cdots, \beta_{N+1})$と書く. そこで, 始状態は$(\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_l, \cdots, \beta_{m-1}, \beta_{m+1}, \cdots, \beta_{N+1})$, 終状態は$(\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_{l-1}, \beta_{l+1}, \cdots, \beta_m, \cdots, \beta_{N+1})$で定められることになる. 考える行列要素は

$$\begin{aligned}
&\langle n_1, \cdots, n_i=0, \cdots, n_j=1, \cdots | V^{(1)} | n_1, \cdots, n_i=1, \cdots, n_j=0, \cdots \rangle \\
&= \langle \beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_{l-1}, \beta_{l+1}, \cdots, \beta_m, \cdots, \beta_{N+1} | V^{(1)} | \beta_1, \cdots, \beta_l, \cdots, \beta_{m-1}, \beta_{m+1}, \cdots, \beta_{N+1} \rangle \\
&= \frac{1}{N!} \int \Big[\sum_{P_2} \delta_{P_2} U_{P_2} \{ \varphi_{\beta_1}{}^*(X_1) \cdots \varphi_{\beta_{l-1}}{}^*(X_{l-1}) \varphi_{\beta_{l+1}}{}^*(X_l) \varphi_{\beta_{l+2}}{}^*(X_{l+1}) \cdots \\
&\quad \cdot \varphi_{\beta_{m-1}}{}^*(X_{m-2}) \varphi_{\beta_m}{}^*(X_{m-1}) \varphi_{\beta_{m+1}}{}^*(X_m) \cdots \varphi_{\beta_{N+1}}{}^*(X_N) \} \Big] \cdot \left(\sum_{i=1}^N v^{(1)}(X_i) \right) \\
&\quad \cdot \Big[\sum_{P_1} \delta_{P_1} U_{P_1} \{ \varphi_{\beta_1}(X_1) \cdots \varphi_{\beta_{l-1}}(X_{l-1}) \varphi_{\beta_l}(X_l) \varphi_{\beta_{l+1}}(X_{l+1}) \cdots \\
&\quad \cdot \varphi_{\beta_{m-1}}(X_{m-1}) \varphi_{\beta_{m+1}}(X_m) \cdots \varphi_{\beta_{N+1}}(X_N) \} \Big] \prod_{i=1}^N dX_i
\end{aligned}$$

である. 右辺の積分に現れている

$$\varphi_{\beta_{l+1}}{}^*(X_l) \varphi_{\beta_{l+2}}{}^*(X_{l+1}) \cdots \varphi_{\beta_{m-1}}{}^*(X_{m-2}) \varphi_{\beta_m}{}^*(X_{m-1})$$

で, 変数X_lとX_{l+1}の入れかえを行い, 次いでX_lとX_{l+2}の入れかえを行い, 次次と進んでX_lとX_{m-1}の入れかえを行うと

$$\varphi_{\beta_{l+1}}{}^*(X_{l+1}) \varphi_{\beta_{l+2}}{}^*(X_{l+2}) \cdots \varphi_{\beta_{m-1}}{}^*(X_{m-1}) \varphi_{\beta_m}{}^*(X_l)$$

となる. この変数の入れかえは行列式(9.1.7)で列の入れかえを行ったことに相当するので, この入れかえに対して因数$(-1)^{\Sigma(\beta_{l+1}, \beta_{m-1})}$がかかる($\sum(\beta_{l+1}, \beta_{m-1})$は粒子状態$\beta_l$と$\beta_m$の間にある1粒子状態を占める粒子数に相当する). この入

れかえは上の積分の $\sum_{P_2}\delta_{P_2}U_{P_2}$ の各項の中から，$\sum_{P_1}\delta_{P_1}U_{P_1}$ の中の

$$\varphi_{\beta_l}(X_l)\varphi_{\beta_{l+1}}(X_{l+1})\varphi_{\beta_{l+2}}(X_{l+2})\cdots\varphi_{\beta_{m-1}}(X_{m-1})$$

とかけて積分 ($v^{(1)}(X_l)$ をはさんで) すべき項をとり出したことになっている．$\sum_{P_1}\delta_{P_1}U_{P_1}$ の各項について同様な操作を施して積分を実行すると

$$\langle\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_{l-1},\beta_{l+1},\cdots,\beta_m,\cdots,\beta_{N+1}|V^{(1)}|\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_l,\cdots,\beta_{m-1},\beta_{m+1},\cdots,\beta_{N+1}\rangle$$
$$=(-1)^{\Sigma(\beta_{l+1},\beta_{m-1})}v_{\beta_m\beta_l}{}^{(1)} \tag{9.2.9}$$

である．$(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_{N+1})$ の代りに $(n_1,n_2,\cdots)$ で表せば

$$\left\langle n_1,n_2,\cdots,n_i=0,\cdots,n_j=1,\cdots\left|\sum_{k=1}^{N}v^{(1)}(X_k)\right|n_1,n_2,\cdots,n_i=1,\cdots,n_j=0,\cdots\right\rangle$$
$$=(-1)^{\Sigma(i+1,j-1)}v_{ji}{}^{(1)} \tag{9.2.10}$$

である．同様にして，

$$\left\langle n_1,n_2,\cdots,n_i=1,\cdots,n_j=0,\cdots\left|\sum_{k=1}^{N}v^{(1)}(X_k)\right|n_1,n_2,\cdots,n_i=0,\cdots,n_j=1,\cdots\right\rangle$$
$$=(-1)^{\Sigma(i+1,j-1)}v_{ij}{}^{(1)} \tag{9.2.11}$$

である．

また，対角要素が

$$\left\langle n_1,n_2,\cdots\left|\sum_{k=1}^{N}v^{(1)}(X_k)\right|n_1,n_2,\cdots\right\rangle=\sum_{i=1}^{\infty}n_iv_{ii}{}^{(1)} \tag{9.2.12}$$

であることも容易に示すことができる．

b） 生成・消滅演算子

(*9.2.7*) あるいは (*9.2.10*) などの行列要素は，演算子 $V^{(1)}$ の力学的性質に関係する部分 $v_{ij}{}^{(1)}$ と，系の状態 n_i に関係する部分とから成っている．後者の部分だけを取り出して演算子的に取扱うために，次のような演算子 $c_i, c_i{}^\dagger$ を導入する．

Bose 粒子の場合

$$c_i|n_1,\cdots,n_i,\cdots\rangle=\sqrt{n_i}\,|n_1,\cdots,n_i-1,\cdots\rangle \tag{9.2.13 a}$$

すなわち

$$\langle n_1,\cdots,n_i-1,\cdots|c_i|n_1,\cdots,n_i,\cdots\rangle=\sqrt{n_i}, \tag{9.2.14 a}$$

$c_i{}^\dagger$ はこれに Hermite 共役な演算子で

$$\langle n_1,\cdots,n_i,\cdots|c_i{}^\dagger|n_1,\cdots,n_i-1,\cdots\rangle=\sqrt{n_i} \tag{9.2.14 b}$$

すなわち

$$c_i^\dagger|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle = \sqrt{n_i+1}\,|n_1, \cdots, n_i+1, \cdots\rangle \qquad (9.2.13\,b)$$

と定義する．

c_i は粒子状態 i にある粒子の数が1個少ない状態に系を移す演算子であり，$c_i^\dagger$ は粒子状態 i にある粒子の数が1個多い状態に系を移す演算子である．すなわち，$c_i^\dagger$ は粒子状態 i に粒子を作り出す演算子であり，c_i は粒子状態 i にある粒子を消滅させる演算子である．このことから，このような性質を持つ演算子を**生成・消滅の演算子**といっている．(9.2.13 a)～(9.2.14 b) は系の全粒子数には関係なく，関係する粒子状態を占める粒子数にだけ関係している．しかし，c_i, $c_i^\dagger$ は系の全粒子数を1つ変化させる演算子であり，このような演算子は系の全粒子数を固定した状態空間ではでてこない．前節で述べたように状態空間を拡張してはじめて定義できるものである．系の粒子数が変化する現象(たとえば光子の吸収や放出現象)を取り扱うにはこの演算子が有用である．

(9.2.13 a), (9.2.13 b) から

$$c_i^\dagger c_i|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle = n_i|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle$$
$$c_i c_i^\dagger|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle = (n_i+1)|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle$$

となるから，これを併せて

$$(c_i c_i^\dagger - c_i^\dagger c_i)|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle = |n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle \qquad (9.2.15)$$

である．また，$i \neq k$ に対して

$$c_k^\dagger c_i|n_1, \cdots, n_i, \cdots, n_k, \cdots\rangle = \sqrt{(n_k+1)n_i}\,|n_1, \cdots, n_i-1, \cdots, n_k+1, \cdots\rangle$$
$$c_i c_k^\dagger|n_1, \cdots, n_i, \cdots, n_k, \cdots\rangle = \sqrt{(n_k+1)n_i}\,|n_1, \cdots, n_i-1, \cdots, n_k+1, \cdots\rangle$$

であるから

$$(c_i c_k^\dagger - c_k^\dagger c_i)|n_1, \cdots, n_i, \cdots, n_k, \cdots\rangle = 0 \qquad (9.2.16)$$

同様にして($i=k$ の時を含めて)

$$(c_i c_k - c_k c_i)|n_1, \cdots, n_i, \cdots, n_k, \cdots\rangle = 0 \qquad (9.2.17)$$
$$(c_i^\dagger c_k^\dagger - c_k^\dagger c_i^\dagger)|n_1, \cdots, n_i, \cdots, n_k, \cdots\rangle = 0 \qquad (9.2.18)$$

という関係が得られる．(9.2.15)～(9.2.18) は $(n_1, \cdots, n_i, \cdots, n_k, \cdots)$ が何であっても成り立つから，演算子として

$$\left.\begin{aligned} &c_i c_k^\dagger - c_k^\dagger c_i \equiv [c_i, c_k^\dagger] = \delta_{ik} \\ &c_i c_k - c_k c_i = 0, \qquad c_i^\dagger c_k^\dagger - c_k^\dagger c_i^\dagger = 0 \end{aligned}\right\} \qquad (9.2.19)$$

という関係が成り立つ．また

$$c_i^\dagger c_i|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle = n_i|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle \tag{9.2.20}$$

であるから

$$N_i = c_i^\dagger c_i \tag{9.2.21}$$

という演算子は粒子状態 i にある粒子数を固有値として持つ演算子で，**数演算子**と呼ばれる．

すべての $n_i=0$ である状態は，どの粒子状態も空であるので，これを'真空'と名づけ，$|0\rangle$ で表す．状態 i にだけ粒子が1個あるような状態は $|0\rangle$ に $c_i^\dagger$ を演算して得られる：$|0, \cdots, n_i=1, 0, \cdots\rangle = c_i^\dagger|0\rangle$．$c_i^\dagger$ の行列要素から

$$|0, \cdots, n_i=2, 0, \cdots\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} c_i^\dagger|0, \cdots, n_i=1, 0, \cdots\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}} c_i^\dagger c_i^\dagger|0\rangle$$

この操作を続けて

$$|0, \cdots, n_i=m, 0, \cdots\rangle = \frac{1}{\sqrt{m!}}(c_i^\dagger)^m|0\rangle$$

である．これを一般化すると，$|n_1, n_2, \cdots\rangle$ は真空から

$$|n_1, n_2, \cdots\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2! \cdots}} \prod (c_i^\dagger)^{n_i}|0\rangle \tag{9.2.22}$$

という操作で作られる．

このような性質を持つ $c_i, c_i^\dagger$ を用いると，1粒子演算子 $V^{(1)}$ は，占有数表示では(9.2.7)から

$$V^{(1)} = \sum_{i,j} v_{ij}^{(1)} c_i^\dagger c_j \tag{9.2.23}$$

という形に書くことができることがわかる．

Fermi 粒子の場合 同様のことを Fermi 粒子系の場合にも行ってみる．Bose 粒子の場合と同様に，行列要素(9.2.10), (9.2.11)は $V^{(1)}$ の力学的性質に関係する部分 $v_{ij}^{(1)}$ と，系の状態 $(n_1, n_2, \cdots)$ に関係する部分とから成っている．後者の部分を取り扱うため，粒子を状態 i に作り出す演算子 $c_i^\dagger$ と，状態 i にある粒子を消滅させる演算子 c_i を考えると，(9.2.10)から

$$\langle n_1, \cdots, n_i=0, \cdots, n_j=1, \cdots|c_j^\dagger c_i|n_1, \cdots, n_i=1, \cdots, n_j=0, \cdots\rangle = (-1)^{\Sigma(i+1, j-1)}$$

であればよい．そのためには

$$\langle n_1, \cdots, n_i=0, \cdots | c_i | n_1, \cdots, n_i=1, \cdots \rangle = (-1)^{\Sigma(1, i-1)} \qquad (9.2.24\,a)$$

$$\langle n_1, \cdots, n_j=1, \cdots | c_j^\dagger | n_1, \cdots, n_j=0, \cdots \rangle = (-1)^{\Sigma(1, j-1)} \qquad (9.2.24\,b)$$

であればよい．これ以外の行列要素は 0 である．

粒子状態 $i \to j$ の遷移を与えるためには $c_i c_j^\dagger$ を演算してもよい．ところで，これの行列要素を計算すると

$$\begin{aligned}&\langle \cdots, n_i=0, \cdots, n_j=1, \cdots | c_i c_j^\dagger | \cdots, n_i=1, \cdots, n_j=0, \cdots \rangle \\ &= \langle \cdots, n_i=0, \cdots, n_j=1, \cdots | c_i | \cdots, n_i=1, \cdots, n_j=1, \cdots \rangle \\ &\quad \cdot \langle \cdots, n_i=1, \cdots, n_j=1, \cdots | c_j^\dagger | \cdots, n_i=1, \cdots, n_j=0 \rangle \\ &= (-1)^{\Sigma(1, j-1)} \times (-1)^{\Sigma(1, i-1)}\end{aligned}$$

であるが，右辺に出てくる $\sum(1, j-1)$ は状態 $(j-1)$ までを占める粒子数であるから

$$\sum(1, j-1) = \sum(1, i-1) + 1 + \sum(i+1, j-1)$$

である．したがって上の行列要素の右辺は

$$(-1)^{\Sigma(1, i-1)+1+\Sigma(i+1, j-1)+\Sigma(1, i-1)} = -(-1)^{\Sigma(i+1, j-1)}$$

となる．これと $c_j^\dagger c_i$ の行列要素とから

$$\langle \cdots, n_i=0, \cdots, n_j=1, \cdots | (c_i c_j^\dagger + c_i^\dagger c_i) | \cdots, n_i=1, \cdots, n_j=0, \cdots \rangle = 0$$

である．(9.2.11) に対応して

$$\langle \cdots, n_i=1, \cdots, n_j=0, \cdots | (c_i c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i) | \cdots, n_i=0, \cdots, n_j=1, \cdots \rangle = 0$$

でもある．したがって，演算子として

$$c_i c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i = 0 \qquad (i \neq j)$$

という関係が成り立つ．

次に $c_i^\dagger c_i$ という演算子を考えると，これは対角形であり，その対角要素は $n_i=1$ ならば 1，$n_i=0$ ならば 0 となるから

$$N_i = c_i^\dagger c_i$$

はやはり数演算子である．$c_i c_i^\dagger$ について上と同様の計算を行うと

$$\langle \cdots, n_i, \cdots | c_i c_i^\dagger | \cdots, n_i, \cdots \rangle = 1 - n_i$$

であることがわかる．$c_i c_j$, $c_i^\dagger c_j^\dagger$ にも同様の考察を行うと

$$\left.\begin{aligned}&c_i c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i = \delta_{ij} \\ &c_i c_j + c_j c_i = 0, \qquad c_i^\dagger c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i^\dagger = 0\end{aligned}\right\} \qquad (9.2.25)$$

という関係が得られる．

演算子 A, B について $AB+BA$ を $[A, B]_+$ あるいは $\{A, B\}$ と書き，これを A, B に対する **Fermi 型交換子**あるいは**反交換子**という．(9.2.25) で $c, c^\dagger$ についての反交換関係が定義されたことになる．

真空から N 粒子系を作り出すには，Bose 粒子系の場合と同じく，$c^\dagger$ を $|0\rangle$ に次々と演算すればよい．ただ，今度は $c^\dagger$ は反可換であるから順序が問題である．粒子状態の番号はエネルギーの低い方からつけたので

$$|n_{\alpha_1}, n_{\alpha_2}, \cdots, n_{\alpha_N}\rangle = c_{\alpha_N}{}^\dagger \cdots c_{\alpha_2}{}^\dagger c_{\alpha_1}{}^\dagger |0\rangle \tag{9.2.26}$$

である．

この生成・消滅演算子を用いて $V^{(1)}$ が

$$V^{(1)} = \sum_{i,j} v_{ij}{}^{(1)} c_i{}^\dagger c_j \tag{9.2.27}$$

と書けることは Bose 粒子の場合と同様である．

以上は 1 粒子演算子について考えたが，2 粒子演算子も，全く同様に $c, c^\dagger$ を用いて書ける．

$$V^{(2)} = \sum_{i,j} v^{(2)}(X_i, X_j)$$

として

$$V^{(2)} = \sum_{ijkl} v_{ij,kl}{}^{(2)} c_i{}^\dagger c_j{}^\dagger c_l c_k, \tag{9.2.28}$$

ただし

$$v_{ij,kl}{}^{(2)} = \int dX dX' \varphi_i{}^*(X) \varphi_j{}^*(X') v^{(2)}(X, X') \varphi_k(X) \varphi_l(X') \tag{9.2.29}$$

である．

生成・消滅演算子の演算子としての性質は交換関係 (9.2.19) および (9.2.25) で定められる．逆に，この交換関係から出発して $c, c^\dagger$ が生成・消滅演算子の性質を持っていることを示すことができる．例として，Bose 粒子の場合に相当する (9.2.19) を満たす演算子の組 $\{c_i\}$, $\{c_i{}^\dagger\}$ を考える．(9.2.21) によって演算子 N_i を定義すると，$c, c^\dagger$ の交換関係を用いて $[N_i, N_k]=0$ である．N_i は互いに可換であるから $\{N_i\}$ の同時固有状態で空間を張ることができる．N_i の固有値を n_i と書いて $|n_1, n_2, \cdots\rangle$ を基底ベクトルに選ぶ．N と c あるいは $c^\dagger$ との交換関係を作ってみると

$$[N_i, c_i{}^\dagger] = c_i{}^\dagger, \quad [N_i, c_i] = -c_i \tag{9.2.30}$$

である．したがって

$$\langle n_1', n_2', \cdots, n_i', \cdots|c_i^\dagger|n_1, n_2, \cdots, n_i, \cdots\rangle = \langle \cdots, n_i', \cdots|[N_i, c_i^\dagger]|\cdots, n_i, \cdots\rangle$$
$$= (n_i'-n_i)\langle \cdots, n_i', \cdots|c_i^\dagger|\cdots, n_i, \cdots\rangle$$

すなわち

$$(n_i'-n_i-1)\langle \cdots, n_i', \cdots|c_i^\dagger|\cdots, n_i, \cdots\rangle = 0. \qquad (9.2.31\,a)$$

同様に

$$(n_i'-n_i+1)\langle \cdots, n_i', \cdots|c_i|\cdots, n_i, \cdots\rangle = 0. \qquad (9.2.31\,b)$$

このことは，$c_i^\dagger, c_i$ が N_i の固有値が1だけ異なる状態の間でのみ行列要素を持つことを示している．また，N_i の固有値は1ずつ異なっていることがわかる．

次に

$$N_i c_i^\dagger|\cdots, n_i, \cdots\rangle = (c_i^\dagger N_i + c_i^\dagger)|\cdots, n_i, \cdots\rangle = (n_i+1)c_i^\dagger|\cdots, n_i, \cdots\rangle$$

であるから，$c_i^\dagger|\cdots, n_i, \cdots\rangle$ は N_i の固有状態で固有値が n_i+1 である．同様にして，$c_i|\cdots, n_i, \cdots\rangle$ は N_i の固有状態で固有値が n_i-1 である．c_i を続けて演算して行くと，いつかは固有値が負であるような固有状態が出現するか，あるいはどこかで $c_i\cdots c_i|\cdots, n_i, \cdots\rangle$ が零ベクトルになるかどちらかである．ところで $N_i=c_i^\dagger c_i$ という定義から N_i の固有値は負にはなり得ない．そこで，どこかで $c_i|\cdots\rangle=0$ という状態 $|\cdots\rangle$ が現れる．この状態に対しては $N_i|\cdots\rangle=0$ だから N_i の固有値は0である．このことから N_i の固有値は0または正の整数である．そこで，N_i を i 状態の粒子数を表す演算子と考えるならば，$|n_1, n_2, \cdots\rangle$ は占有数表示での系の基底ベクトルであり，$c_i^\dagger, c_i$ は粒子状態 i にある粒子を1個増しあるいは減らす演算子，すなわち生成・消滅演算子である．

上では生成・消滅演算子を粒子状態 $\{i\}$ に即して定義したが，座標に即して定義することもできる．

$$\psi(X) = \sum_i c_i\varphi_i(X), \qquad \psi^\dagger(X) = \sum c_i^\dagger\varphi_i^*(X) \qquad (9.2.32)$$

という演算子を定義する．$c_i, c_i^\dagger$ が Bose 型交換関係を満たすか，Fermi 型交換関係を満たすかに応じて ψ に添字 B, F をつけて表すことにする．どちらでもよい時は添字をつけない．c の交換関係と，関数系 $\{\varphi_i(X)\}$ の完全性とから

$$\left.\begin{aligned}[][\psi_B(X), \psi_B^\dagger(X')] &= \sum_{i,j}[c_i, c_j^\dagger]\varphi_i(X)\varphi_j^*(X') \\ &= \sum_i \varphi_i(X)\varphi_i^*(X') = \delta(X, X') \\ [\psi_B(X), \psi_B(X')] &= [\psi_B^\dagger(X), \psi_B^\dagger(X')] = 0\end{aligned}\right\} \qquad (9.2.33)$$

$$\left.\begin{array}{l}[\psi_{\mathrm{F}}(X),\psi_{\mathrm{F}}{}^{\dagger}(X')]_{+}=\delta(X,X')\\ [\psi_{\mathrm{F}}(X),\psi_{\mathrm{F}}(X')]_{+}=[\psi_{\mathrm{F}}{}^{\dagger}(X),\psi_{\mathrm{F}}{}^{\dagger}(X')]_{+}=0\end{array}\right\}\qquad(9.2.34)$$

という交換関係が得られる．ψ は最初は特定の粒子状態系 $\{i\}$ を使って(9.2.32)で定義したが，それを忘れて，(9.2.33)または(9.2.34)の交換関係を満たす演算子であると考えることができる．系の全粒子数を与える演算子 $N=\sum_i N_i$ は

$$N=\sum_i c_i{}^{\dagger}c_i=\int\psi^{\dagger}(X)\psi(X)dX\qquad(9.2.35)$$

と書けるから，$\psi^{\dagger}(X)\psi(X)$ は粒子密度を表す演算子である．次に，N と $\psi^{\dagger}$ との交換関係を作ると

$$[N,\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X)]=\int\{\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X')\psi_{\mathrm{B}}(X')\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X)-\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X)\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X')\psi_{\mathrm{B}}(X')\}dX'$$

$$=\int\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X')\delta(X',X)dX'=\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X).\qquad(9.2.36\,a)$$

同様に

$$[N,\psi_{\mathrm{F}}{}^{\dagger}(X)]=\psi_{\mathrm{F}}{}^{\dagger}(X)\qquad(9.2.36\,b)$$

である．N_i の固有値がすべて 0 である状態(真空)を $|0\rangle$ と書くと，$N|0\rangle=0$ であり，($c,c^{\dagger}$ の性質から)

$$\psi(X)|0\rangle=0,\qquad\langle 0|\psi^{\dagger}(X)=0\qquad(9.2.37)$$

である．また(9.2.36)から

$$N\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X)|0\rangle=(N\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X)-\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X)N)|0\rangle=\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X)|0\rangle,$$
$$N\psi_{\mathrm{F}}{}^{\dagger}(X)|0\rangle=\psi_{\mathrm{F}}{}^{\dagger}(X)|0\rangle$$

である．すなわち，$\psi^{\dagger}|0\rangle$ は N の固有値 1 の固有状態であり，粒子数が 1 の状態である．同様にして，$\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X_1)\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X_2)|0\rangle$ あるいは $\psi_{\mathrm{F}}{}^{\dagger}(X_1)\psi_{\mathrm{F}}{}^{\dagger}(X_2)|0\rangle$ は粒子数が 2 の状態である．ψ の定義から

$$\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X_1)\psi_{\mathrm{B}}{}^{\dagger}(X_2)|0\rangle=\sum_{i,j}\varphi_i{}^{*}(X_1)\varphi_j{}^{*}(X_2)c_i{}^{\dagger}c_j{}^{\dagger}|0\rangle$$
$$=\sqrt{2}\sum_{i\leq j}\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_i{}^{*}(X_1)\varphi_j{}^{*}(X_2)+\varphi_j{}^{*}(X_1)\varphi_i{}^{*}(X_2))c_i{}^{\dagger}c_j{}^{\dagger}|0\rangle$$

であるが，(9.1.5)から

$$\text{右辺}=\sqrt{2}\sum_{i\leq j}\Psi_{\mathrm{S}}{}^{ij*}(X_1,X_2)|n_i=1,n_j=1\rangle.$$

この操作を続けると，一般に N 粒子系に対して

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\psi_B{}^\dagger(X_1)\psi_B{}^\dagger(X_2)\cdots\psi_B{}^\dagger(X_N)|0\rangle=\sum_{(n_i)}\Psi_S{}^{n_1n_2\cdots *}(X_1,\cdots,X_N)|n_1,n_2,\cdots\rangle \tag{9.2.38}$$

あるいは

$$\Psi_S{}^{n_1n_2\cdots}(X_1,\cdots,X_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\psi_B(X_N)\cdots\psi_B(X_2)\psi_B(X_1)|n_1,n_2,\cdots\rangle \tag{9.2.39 a}$$

である.

Fermi 粒子系についても同様な考察ができ

$$\Psi_A{}^{n_1n_2\cdots}(X_1,\cdots,X_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\psi_F(X_N)\cdots\psi_F(X_2)\psi_F(X_1)|n_1n_2\cdots\rangle \tag{9.2.39 b}$$

となる.

c) Fock 空間

粒子状態系 $\{i\}$ を用いて定義された生成・消滅演算子 $c, c^\dagger$ について，占有数表示での行列要素を(9.2.13 a, b)および(9.2.24 a, b)で見た．座標に即して定義された生成・消滅演算子 $\psi, \psi^\dagger$ でこれに対応するものを求めてみよう．そのためにまず，N 粒子状態として

$$|X_1,X_2,\cdots,X_N;N\rangle=\frac{1}{\sqrt{N!}}\psi^\dagger(X_1)\psi^\dagger(X_2)\cdots\psi^\dagger(X_N)|0\rangle \tag{9.2.40}$$

を考える((9.2.38)の右辺に相当している).

$$\psi(X)|X_1,\cdots,X_N;N\rangle=\frac{1}{\sqrt{N!}}\psi(X)\psi^\dagger(X_1)\cdots\psi^\dagger(X_N)|0\rangle$$

であるが，ψ と $\psi^\dagger$ の交換関係を用いて $\psi(X)$ を右へ移すと，$\psi(X)|0\rangle=0$ を用いて

$$\begin{aligned}&\psi_B(X)|X_1,\cdots,X_N;N\rangle\\&=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{i=1}^{N}\delta(X,X_i)\psi_B{}^\dagger(X_1)\cdots\psi_B{}^\dagger(X_{i-1})\psi_B{}^\dagger(X_{i+1})\cdots\psi_B{}^\dagger(X_N)|0\rangle\\&=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N}\delta(X,X_i)|X_1,\cdots,X_{i-1},X_{i+1},\cdots,X_N;N-1\rangle\qquad(\text{Bose 粒子系}),\end{aligned} \tag{9.2.41 a}$$

$$\psi_{\mathrm{F}}(X)|X_1, \cdots, X_N; N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum(-1)^{i-1}\delta(X, X_i)|X_1, \cdots, X_{i-1}, X_{i+1}, \cdots, X_N; N-1\rangle$$

(Fermi 粒子系)　(*9. 2. 41 b*)

である．また，$|X_1, \cdots, X_N; N\rangle$ の定義から

$$\psi^\dagger(X)|X_1, \cdots, X_N; N\rangle = \sqrt{N+1}\,|X, X_1, X_2, \cdots, X_N; N+1\rangle \quad (9.2.42)$$

である．

§9.1で考えたように状態空間を拡張して，1粒子系空間，2粒子系空間，…のすべての和空間を考え，その中での一般的な状態を $|\Psi\rangle$ とすると，$|X_1, \cdots, X_N; N\rangle$ はその中での N 粒子系の状態であり

$$\langle X_1, \cdots, X_N; N|\Psi\rangle = \sum_{(n_i)} \Psi_{\mathrm{S,A}}{}^{n_1 n_2 \cdots}(X_1, \cdots, X_N)\langle n_1, n_2, \cdots|\Psi\rangle \quad (9.2.43)$$

である．(*9. 2. 41*)～(*9. 2. 42*)は

$$\langle X_1, \cdots, X_N; N|\psi_{\mathrm{B}}{}^\dagger(X)|\Psi\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N}\delta(X, X_i)\langle X_1, \cdots, X_{i-1}, X_{i+1}, \cdots, X_N; N-1|\Psi\rangle$$

(Bose 粒子系)，(*9. 2. 44*)

$$\langle X_1, \cdots, X_N; N|\psi_{\mathrm{F}}{}^\dagger(X)|\Psi\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{i=1}^{N}(-1)^{i-1}\delta(X, X_i)\langle X_1, \cdots, X_{i-1}, X_{i+1}, \cdots, X_N; N-1|\Psi\rangle$$

(Fermi 粒子系)　(*9. 2. 45*)

$$\langle X_1, \cdots, X_N; N|\psi(X)|\Psi\rangle = \sqrt{N+1}\langle X, X_1, \cdots, X_N; N+1|\Psi\rangle \quad (9.2.46)$$

である．ここで考えているような空間を**Fock 空間**といっている．この空間では，状態ベクトル $|\Psi\rangle$ は，個別の粒子数 N を持つ系の状態を成分とするベクトルと見ることができる．すなわち，$\langle 0|\Psi\rangle, \langle X_1; 1|\Psi\rangle, \cdots$ を成分として

$$|\Psi\rangle = \begin{bmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_1(X_1) \\ \Psi_2(X_1, X_2) \\ \vdots \\ \Psi_N(X_1, \cdots, X_N) \\ \vdots \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} \langle 0|\Psi\rangle \\ \langle X_1; 1|\Psi\rangle \\ \langle X_1, X_2; 2|\Psi\rangle \\ \vdots \\ \langle X_1, \cdots, X_N; N|\Psi\rangle \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (9.2.47)$$

と書ける．各成分は(9. 2. 43)で定義されている．$\langle X_1, \cdots, X_N; N|\Psi\rangle$ は，各粒子の座標が $X_1, \cdots, X_N$ であるような N 粒子系の状態の確率振幅を与えている．この表示を **Fock 表示**という．この表示では $\psi(X)$, $\psi^\dagger(X)$ は

$$\psi(X)\begin{bmatrix}\Psi_0\\ \Psi_1(X_1)\\ \Psi_2(X_1, X_2)\\ \vdots\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\Psi_1(X)\\ \sqrt{2}\,\Psi_2(X, X_1)\\ \sqrt{3}\,\Psi_3(X, X_1, X_2)\\ \vdots\end{bmatrix}, \tag{9. 2. 48 a}$$

$$\psi_{\mathrm{B}}{}^\dagger(X)\begin{bmatrix}\Psi_0\\ \Psi_1(X_1)\\ \Psi_2(X_1, X_2)\\ \vdots\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\delta(X, X_1)\Psi_0\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\{\delta(X, X_1)\Psi_1(X_2)+\delta(X, X_2)\Psi_1(X_1)\}\\ \vdots\end{bmatrix}, \tag{9. 2. 48 b}$$

$$\psi_{\mathrm{F}}{}^\dagger(X)\begin{bmatrix}\Psi_0\\ \Psi_1(X_1)\\ \Psi_2(X_1, X_2)\\ \vdots\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\delta(X, X_1)\Psi_0\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\{\delta(X, X_1)\Psi_1(X_2)-\delta(X, X_2)\Psi_1(X_1)\}\\ \vdots\end{bmatrix} \tag{9. 2. 48 c}$$

である．これらが Fock 空間での ψ, $\psi^\dagger$ の表示である．

最後に，$|\Psi\rangle$ に対する運動方程式を求めよう．N 粒子系のハミルトニアンとして(9. 1. 3)を取る．N の値の如何にかかわらず系のハミルトニアンがこの形であるとする．$U(X_i)$ が1粒子演算子，$V(X_i, X_j)$ が2粒子演算子である．1粒子演算子，2粒子演算子で与えられる物理量は，占有数表示で(9. 2. 23)または(9. 2. 27)，(9. 2. 28)と書けた．ψ, $\psi^\dagger$ で書くと

$$V^{(1)}=\sum_{i,j}U_{ij}c_i{}^\dagger c_j=\int\sum_{i,j}c_i{}^\dagger\varphi_i{}^*(X)U(X)\varphi_j(X)c_j dX$$
$$=\int\psi^\dagger(X)U(X)\psi(X)dX. \tag{9. 2. 49}$$

同様に

$$V^{(2)} = \int \psi^{\dagger}(X)\psi^{\dagger}(X')V(X, X')\psi(X')\psi(X)dXdX' \quad (9.2.50)$$

である．粒子の運動エネルギー演算子も1粒子演算子であるので

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int \psi^{\dagger}(X)\nabla^2\psi(X)dX$$

と書ける．これを併せると，(9.1.3)のハミルトニアン H は

$$H = \int \psi^{\dagger}(X)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(X)\right\}\psi(X)dX$$
$$+\frac{1}{2}\int \psi^{\dagger}(X)\psi^{\dagger}(X')V(X, X')\psi(X')\psi(X)dXdX' \quad (9.2.51)$$

を N 粒子系空間で考えたものになっている．したがって $|\Psi\rangle$ に対する Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = H|\Psi\rangle \quad (9.2.52)$$

である．$|\Psi\rangle$ の中で N 粒子系成分をとり出すと

$$i\hbar\frac{\partial \Psi_N(X_1, \cdots, X_N)}{\partial t}$$
$$= \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}\nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{N} U(X_i) + \frac{1}{2}\sum_{i,j} V(X_i, X_j)\right\}\Psi_N(X_1, \cdots, X_N) \quad (9.2.53)$$

で，これが N 粒子系に対する Schrödinger 方程式である．

§9.3　多粒子系の運動と状態 I——基底状態

粒子間に相互作用がある場合に多粒子系の正確な波動関数を求めることは，ごく少数の例外的な場合を別にすれば，一般にはひじょうに困難である．物理的に興味のある多粒子系の多くははなはだ複雑であるので，多くの場合，その特徴を表すと期待される模型が導入される．その場合でも，厳密に解き得てしかも系の物理的性質を再現できるような模型を作ることは難しい．もちろん，物理的性質を多少犠牲にして，厳密に解ける‘模型’を作り，この解の性質を調べることにより多粒子系特有の性質を調べる手がかりを得ることも必要である．しかし，一般には，近似的な解法を求めることが重要である．粒子の種類や数，相互作用の性質，対象とする物理量等に応じてさまざまな近似法がある．

また，多粒子系では運動学的な自由度の数がひじょうに多いので，それらすべてについての知識を要求することは，複雑すぎて，かえって見通しを困難にさせることもないではない．系の性質を代表的に示すような物理量を取り出すことが，多粒子系の運動を理解する上でとくに重要である．近似法も，これに関係していることが多い．以下の節で，多粒子系で興味ある状態や概念とそれに関連する手法の 2, 3 の例を述べる．

a)　密度行列

多粒子系の状態を示す量の 1 つとして密度行列がある．これは粒子の分布を知るために用いられる．N粒子系の状態を 1 つ定め，その波動関数を $\Psi(X_1, X_2, \cdots, X_N)$ とするとき，

$$\rho(X_1, X_2, \cdots, X_N; X_1', X_2', \cdots, X_N') = \Psi(X_1, \cdots, X_N)\Psi^*(X_1', \cdots, X_N') \tag{9.3.1}$$

をその状態の密度行列と名づける．(9.3.1) を $N-1$ 個の座標について (X_i と X_i' とを揃えて) 積分したもの

$$\rho(X, X') = N\int dX_2 \cdots \int dX_N \Psi(X, X_2, \cdots, X_N)\Psi^*(X', X_2, \cdots, X_N) \tag{9.3.2}$$

を 1 粒子密度行列という．この行列が Hermite 型であることは明らかである．1 粒子演算子 $V^{(1)} = \sum_{i=1}^{N} v^{(1)}(X_i)$ ((9.2.1)) の期待値は 1 粒子密度行列を用いて

$$\langle V^{(1)} \rangle = \int v^{(1)}(X)\rho(X, X)dX$$

で与えられる．

(9.2.32) で定義された $\psi(X)$, $\psi^\dagger(X)$ を用いると $\rho(X, X')$ は

$$\rho(X, X') = \langle \Psi | \psi^\dagger(X')\psi(X) | \Psi \rangle \tag{9.3.3}$$

と書くこともできる．そこで

$$\hat{\rho}(X, X') = \psi^\dagger(X')\psi(X) \tag{9.3.4}$$

を量子化された 1 粒子密度行列 (演算子) として定義することもできる．$\hat{\rho}(X, X')$ のトレースをとると

$$\mathrm{tr}\,\hat{\rho}(X, X') = \int \psi^\dagger(X)\psi(X)dX = N \tag{9.3.5}$$

で(9. 2. 35)の全粒子数演算子に他ならない．また，この $\hat{\rho}$ を用いて，1粒子演算子，たとえば(9. 2. 23)または(9. 2. 27)の $V^{(1)}$ は

$$V^{(1)}=\int\psi^{\dagger}(X)v^{(1)}(X)\psi(X)dX=\int v^{(1)}(X)\hat{\rho}(X,X)dX$$

$$=\mathrm{tr}\,(v^{(1)}\hat{\rho}) \qquad (9.3.6)$$

である．ここで，$\mathrm{tr}\,(v^{(1)}\hat{\rho})$ の中の $v^{(1)}$ は，$v^{(1)}(X)$ よりも，むしろ $v^{(1)}(X',X)=v^{(1)}(X)\delta(X,X')=\sum_{i,j}v_{ij}{}^{(1)}\varphi_i(X')\varphi_j{}^*(X)$ で定義された行列(すなわち，行列 $v_{ij}{}^{(1)}$ を座標表示にしたもの)と見るべきである．

$\hat{\rho}(X,X')$ を演算子 $\hat{\rho}$ の (X,X') 表示と見て

$$\hat{\rho}(X,X')\equiv\langle X|\hat{\rho}|X'\rangle \qquad (9.3.7)$$

と書く．これを占有数表示に変換すると

$$\langle i|\hat{\rho}|j\rangle=\int\langle i|X\rangle\langle X|\hat{\rho}|X'\rangle\langle X'|j\rangle dXdX'$$

$$=\int dXdX'\varphi_i{}^*(X)\left(\sum_{k,l}c_k{}^{\dagger}\varphi_k{}^*(X')c_l\varphi_l(X)\right)\varphi_j(X')=c_j{}^{\dagger}c_i$$

$$(9.3.8)$$

である．したがって(9. 2. 23)は上の(9. 3. 6)と同じ形で

$$V^{(1)}\equiv\sum_{i,j}v_{ij}{}^{(1)}c_i{}^{\dagger}c_j=\sum_{i,j}v_{ij}{}^{(1)}\langle j|\hat{\rho}|i\rangle=\mathrm{tr}\,(v^{(1)}\hat{\rho}) \qquad (9.3.6')$$

である．

すぐにわかるように，$|\Psi\rangle$ を占有数表示で表したとき単一の状態 $|n_1,\cdots\rangle$ になっているならば

$$\langle\Psi|\langle i|\hat{\rho}|j\rangle|\Psi\rangle=n_i\delta_{ij}$$

である．系がたとえば Fermi 粒子系で，状態 $|\Psi\rangle$ の波動関数が1粒子状態 φ_i $(i=1,\cdots,N)$ の積を反対称化した Slater 行列式で与えられる時は

$$\rho(X,X')=\sum_{i=1}^{N}\varphi_i(X)\varphi_i{}^*(X') \qquad (9.3.9)$$

である．この式からも，また上の $\langle\Psi|\langle i|\hat{\rho}|j\rangle|\Psi\rangle$ の式からも，

$$\rho^2=\rho \qquad (9.3.10)$$

であることがわかる．すなわち，$\rho^2=\rho$ という条件は，状態 $|\Psi\rangle$ が占有数表示での単一状態，いいかえれば単一の Slater 行列式で表されることの必要条件であるが，これがまたこのことの十分条件でもあることを示すこともできる．

2粒子演算子の期待値を計算するには1粒子密度行列では不十分で，2粒子密度行列が必要になる．2粒子密度行列は(9. 3. 2)に対応して

$$\begin{aligned}\rho(X_1, X_2; X_1', X_2') &= N(N-1)\int dX_3\cdots\int dX_N \Psi(X_1, X_2, X_3, \cdots, X_N)\,\Psi^*(X_1', X_2', X_3, \cdots, X_N)\\ &= \langle\Psi|\psi^\dagger(X_2')\psi^\dagger(X_1')\psi(X_1)\psi(X_2)|\Psi\rangle \end{aligned}\tag{9. 3. 11}$$

で定義される．この場合も

$$\hat{\rho}(X_1, X_2; X_1', X_2') = \psi^\dagger(X_2')\psi^\dagger(X_1')\psi(X_1)\psi(X_2) \tag{9. 3. 12}$$

と量子化された2粒子密度行列演算子を定義することができる．これを $\hat{\rho}$ の $(X_1, X_2; X_1', X_2')$ 表示と見て占有数表示に変換すると

$$\langle ij|\hat{\rho}|i'j'\rangle = c_{j'}{}^\dagger c_{i'}{}^\dagger c_i c_j \tag{9. 3. 13}$$

である．

2粒子密度行列 $\rho(X_1, X_2; X_1', X_2')$ で，X_1, X_2 と X_1', X_2' を入れかえると複素共役量が得られるから，これも Hermite 型である．また

$$\int \rho(X_1, X_2; X_1', X_2)\,dX_2 = (N-1)\,\rho(X_1, X_1') \tag{9. 3. 14}$$

という関係があることも容易にわかる．もし，状態 $|\Psi\rangle$ が占有数表示で単一の状態で表されている場合には，2粒子密度行列(実際はさらに多粒子の密度行列も) 1粒子密度行列によって定められる．たとえば，Fermi 粒子系では(9. 3. 9)に対応して

$$\begin{aligned}\rho(X_1, X_2; X_1', X_2') &= \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}[\varphi_i(X_1)\varphi_j(X_2)\varphi_i^*(X_1')\varphi_j^*(X_2') - \varphi_i(X_1)\varphi_j(X_2)\varphi_j^*(X_1')\varphi_i^*(X_2')]\\ &= \rho(X_1, X_1')\rho(X_2, X_2') - \rho(X_1, X_2')\rho(X_2, X_1') \end{aligned}\tag{9. 3. 15}$$

という関係が得られる．

2粒子演算子

$$V^{(2)} = \sum_{i,j} v^{(2)}(X_i, X_j)$$

の期待値は

$$\langle V^{(2)}\rangle = \int v^{(2)}(X_1, X_2)\,\rho(X_1, X_2; X_1, X_2)\,dX_1 dX_2 \tag{9. 3. 16}$$

であるから

$$v^{(2)}(X_1, X_2\,;X_1', X_2') = v^{(2)}(X_1, X_2)\,\delta(X_1, X_1')\,\delta(X_2, X_2') \qquad (9.3.17)$$

という行列を定義すると

$$\langle V^{(2)}\rangle = \int v^{(2)}(X_1, X_2\,;X_1', X_2')\,\rho(X_1, X_2\,;X_1', X_2')\,dX_1dX_2dX_1'dX_2'$$

である．この式から $V^{(2)}$ は

$$V^{(2)} = \sum_{ij,i'j'} v_{ij,i'j'}{}^{(2)}\langle i'j'|\hat{\rho}|ij\rangle = \mathrm{tr}\,(v^{(2)}\hat{\rho}) \qquad (9.3.18)$$

と書けることがわかる．$v_{ij,i'j'}{}^{(2)}$ は行列 $v^{(2)}(X_1, X_2\,;X_1', X_2')$ を占有数表示に変換したものである．

2粒子以上の多数粒子密度行列も全く同様に定義することができる．

密度行列の対角成分は粒子密度に対応する．1粒子密度 $\rho(X)=\rho(X, X)$ は X における粒子の平均密度を与える．(9.3.4)に対応して，演算子

$$\hat{\rho}(X) = \psi^{\dagger}(X)\,\psi(X) \qquad (9.3.19)$$

を1粒子密度演算子として定義できる．$\rho(X)=\langle\Psi|\hat{\rho}(X)|\Psi\rangle$ であるから，上の定義と同等に

$$\hat{\rho}(X) = \sum_{i=1}^{N}\delta(X, X_i) \qquad (9.3.20)$$

と置くこともできる．

1粒子密度と同様に，2粒子密度

$$\rho^{(2)}(X, X') = \rho(X, X'\,;X, X') \qquad (9.3.21)$$

を考えることができる．これは，X に1個の粒子があり第2の粒子が X' にある相対確率を与える．(9.3.20)に相当して2粒子密度演算子は

$$\hat{\rho}^{(2)}(X, X') = \sum_{i<j}^{N}[\delta(X, X_i)\,\delta(X', X_j)+\delta(X, X_j)\,\delta(X', X_i)] \qquad (9.3.22)$$

で定義される．

簡単な例として，相互作用のない Fermi 粒子が周期条件をつけた大きな箱の中に入っている場合を考えてみる．いわゆる Fermi 気体である．箱を稜の長さ L の立方体とすると，1粒子状態は

$$\varphi_i(X) = \frac{1}{\sqrt{L^3}}e^{i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{x}}\chi_i \qquad (9.3.23)$$

で与えられる．χ_i はスピン関数である(もし，荷電スピン変数があればこれも含めて考える必要があるが，簡単のため今はスピンだけとし，その大きさは 1/2 と

する)．波数ベクトル $\boldsymbol{k}_i$ は

$$\boldsymbol{k}_i=\frac{2\pi}{L}\boldsymbol{n}_i,\qquad \boldsymbol{n}_i=(n_{ix},n_{iy},n_{iz})\qquad (n_{ix},n_{iy},n_{iz}\text{ は整数})\tag{9.3.24}$$

という関係を満たす．この1粒子状態のエネルギーは，粒子の質量を m とすると $\hbar^2\boldsymbol{k}_i^2/2m$ である．系の最低エネルギー状態は，この1粒子状態を低い方から順次に粒子が占めた状態である．この時の占められた最高の1粒子状態の波数を k_{F} とする．(9.3.15)を用いて

$$\rho^{(2)}(X,X')=\frac{1}{L^3}\sum_i\sum_j[1-e^{i(\boldsymbol{k}_i-\boldsymbol{k}_j)(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}\delta_{s_is_j}]$$

(s_i は状態 i の粒子のスピンの z 成分の固有値)

であるが，i,j についての和を $\boldsymbol{k}$ についての積分に置きかえ $\left(\sum_{\boldsymbol{k}_i}\to\frac{L^3}{(2\pi)^3}\int_{|\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}}}d^3\boldsymbol{k}\right)$ て

$$\begin{aligned}\rho^{(2)}(X,X')&=\frac{k_{\mathrm{F}}^6}{36\pi^4}-\delta_{ss'}\left[\frac{1}{8\pi^3}\int_{|\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}}}d^3\boldsymbol{k}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}\right]^2\\&=\frac{k_{\mathrm{F}}^6}{36\pi^4}-\delta_{ss'}\frac{1}{4\pi^4}\left[\frac{\sin k_{\mathrm{F}}\cdot|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|^3}-k_{\mathrm{F}}\frac{\cos k_{\mathrm{F}}\cdot|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|^2}\right]^2\end{aligned}$$

である．一方，$\rho(X)$ はすぐわかるように定数となり

$$\rho(X)=\frac{k_{\mathrm{F}}^3}{3\pi^2}=\rho_0$$

であるので，$\rho^{(2)}$ は

$$\rho^{(2)}(X,X')=\frac{1}{4}\rho_0^2[1-\delta_{ss'}C^2(k_{\mathrm{F}}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|)]\tag{9.3.25}$$

となる．ただし

$$C(x)=\frac{3}{x^2}\left(\frac{\sin x}{x}-\cos x\right)\tag{9.3.25$'$}$$

である(図9.1)．$x\to0$ で $C(x)\to1$ であるので，(9.3.25)は Pauli の排他律が粒子が互いに近づくことを妨げているということを示している．これが相互作用のない粒子系での Pauli 原理による相関である．

最後に，密度行列に対する運動方程式を求めておく．$\Psi(X_1,\cdots,X_N)$の運動方程

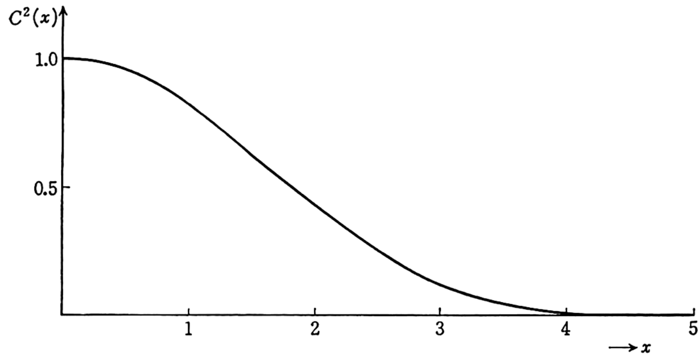


図 9.1　関数 $C^2(x)$

式がハミルトニアン (*9.1.3*) を用いて

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i{}^2+\sum_{i=1}^{N}U(X_i)+\frac{1}{2}\sum_{i,j}V(X_i,X_j)\right\}\Psi$$

で与えられていれば，$\rho(X,X')$ の運動方程式は ($V(X_i,X_j)=V(X_j,X_i)$ であるとして)

$$i\hbar\frac{\partial\rho(X,X')}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2-\nabla'^2)+U(X)-U(X')\right\}\rho(X,X')$$
$$+\int(V(X,X_2)-V(X',X_2))\rho(X,X_2;X',X_2)dX_2 \tag{9.3.26}$$

である．すなわち，2 粒子間相互作用がある場合には，1 粒子密度行列の運動方程式は 2 粒子密度行列を含む．また，2 粒子密度行列の運動方程式を作れば，3 粒子密度行列が含まれる．これを続けると n 粒子密度行列 ($n=1,\cdots,N$) に対する連立した運動方程式が得られることになる．

b)　Hartree 方程式

多粒子系空間の基底として取った 1 粒子状態の関数系 $\{\varphi_i\}$ は，完全系であれば何でもよいわけであるが，できるだけ物理的な意味のあるものの方がわかりやすい．もしも全系の状態が常に $|n_1,n_2,\cdots\rangle$ の 1 項だけで表すことができるなら，系の取扱いは非常に楽である．すなわち，このときには系は独立に運動する粒子の集まりとして取り扱える．互いに相互作用する粒子系では，一般にはすべての状態をこのような形で表すことはできない．しかし，考えている現象の関係するエ

ネルギー領域で，できるだけこの形で表そうとする近似が考えられる．いわゆる1体近似である．通常は系の基底状態についてこのような取扱いをすることが多い．これがHartree近似である．

$\{\varphi_i\}$ の満たす式を

$$H_0\varphi_i(\boldsymbol{x}) \equiv \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+v(\boldsymbol{x})\right\}\varphi_i(\boldsymbol{x}) = \varepsilon_i\varphi_i(\boldsymbol{x}) \qquad (9.3.27)$$

とする．簡単のため，エネルギーの縮退はないとしておく．スピンなどの自由度も考えない．ε_i の小さい方から番号 i がつけてある．系がBose粒子系であれば，1体近似での最低エネルギー状態は $|n_1=N\rangle$ であり，系がFermi粒子系であれば $|n_1=1, \cdots, n_N=1\rangle$ である．この状態 $|\Phi_0\rangle$ は，系のハミルトニアン

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i+U(\boldsymbol{x}_i)\right\}+\frac{1}{2}\sum_{i,j} V(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) \qquad (9.3.28)$$

の固有状態ではない．そこで，この状態での H の期待値ができるだけ小さくなるように φ_i およびそれの H_0 を選ぶ．

Bose粒子の場合には

$$\langle\Phi_0|H|\Phi_0\rangle = \sum_{i=1}^{N}\int\varphi_1{}^*(\boldsymbol{x}_i)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_i+U(\boldsymbol{x}_i)\right\}\varphi_1(\boldsymbol{x}_i)\,d^3\boldsymbol{x}_i$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{i,j}\int\varphi_1{}^*(\boldsymbol{x}_i)\varphi_1{}^*(\boldsymbol{x}_j)\,V(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)\varphi_1(\boldsymbol{x}_i)\varphi_1(\boldsymbol{x}_j)\,d^3\boldsymbol{x}_id^3\boldsymbol{x}_j$$

であるから，φ_1 に対する規格化条件 $\int|\varphi_1(\boldsymbol{x})|^2d^3\boldsymbol{x}=1$ の下で，φ_1 の変分に対して $\langle\Phi_0|H|\Phi_0\rangle$ の変分が0になるという条件から

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(\boldsymbol{x})\right\}\varphi_1(\boldsymbol{x})+\sum_{i=1}^{N}\int\varphi_1{}^*(\boldsymbol{x}_i)\,V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)\varphi_1(\boldsymbol{x}_i)\,d^3\boldsymbol{x}_i\varphi_1(\boldsymbol{x}) = \varepsilon\varphi_1(\boldsymbol{x})$$
$$(9.3.29)$$

という式が得られる．ε はLagrangeの未定係数である．(9.3.27)と比べると

$$v(\boldsymbol{x}) = U(\boldsymbol{x})+\sum_{i}\int\varphi_1{}^*(\boldsymbol{x}_i)\,V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)\varphi_1(\boldsymbol{x}_i)\,d^3\boldsymbol{x}_i \qquad (9.3.30)$$

であればよい．すなわち，粒子状態を定めるポテンシャル v は，その粒子に作用する他粒子の相互作用の平均値と，H の中の1粒子ポテンシャルの和になっていればよい．φ を定める(9.3.27)の $v(\boldsymbol{x})$ が(9.3.30)により φ を通じて定められている，という意味で自己無矛盾になっている．このとき，

$$\langle E_0\rangle = \langle \Phi_0|H|\Phi_0\rangle$$
$$= N\varepsilon - \frac{1}{2}\sum_{i,j}\int \varphi_1{}^*(\boldsymbol{x}_i)\varphi_1{}^*(\boldsymbol{x}_j)V(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)\varphi_1(\boldsymbol{x}_i)\varphi_1(\boldsymbol{x}_j)d^3\boldsymbol{x}_i d^3\boldsymbol{x}_j \tag{9.3.31}$$

である．$\langle E_0\rangle$ が 1 粒子状態のエネルギー ε の N 倍ではないのは，$N\varepsilon$ では粒子間相互作用が 2 重に勘定されることになるからで，Hartree の式ではいつでもこうなる．

Fermi 粒子系の場合には

$$\langle \Phi_0|H|\Phi_0\rangle = \sum_{i=1}^{N}\int \varphi_i{}^*(\boldsymbol{x})\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\boldsymbol{x})\right\}\varphi_i(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x}$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{i,j}\int \varphi_i{}^*(\boldsymbol{x})\varphi_j{}^*(\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\{\varphi_i(\boldsymbol{x})\varphi_j(\boldsymbol{x}') - \varphi_i(\boldsymbol{x}')\varphi_j(\boldsymbol{x})\}d^3\boldsymbol{x}d^3\boldsymbol{x}'$$

であるから，規格化条件 $\int \varphi_i{}^*(\boldsymbol{x})\varphi_j(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x} = \delta_{ij}$ を付加条件として φ_i の変分を行うと，$\langle \Phi_0|H|\Phi_0\rangle$ の変分が 0 になる条件は

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\boldsymbol{x})\right\}\varphi_i(\boldsymbol{x})$$
$$+\sum_{j\neq i}\int V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\{\varphi_j{}^*(\boldsymbol{x}')\varphi_j(\boldsymbol{x}')\varphi_i(\boldsymbol{x}) - \varphi_j{}^*(\boldsymbol{x}')\varphi_j(\boldsymbol{x})\varphi_i(\boldsymbol{x}')\}d^3\boldsymbol{x}'$$
$$= \sum_j \omega_{ij}\varphi_j(\boldsymbol{x}) \tag{9.3.32}$$

となる．ω_{ij} は Lagrange の未定係数である．左辺の第 2 項は直接項

$$V_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{x})\varphi_i(\boldsymbol{x}) = \int\sum_{j\neq i}|\varphi_j(\boldsymbol{x}')|^2 V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')d^3\boldsymbol{x}'\varphi_i(\boldsymbol{x}) \tag{9.3.33 a}$$

と交換項

$$V_{\mathrm{E}}(\boldsymbol{x})\varphi_i(\boldsymbol{x}) = -\int\sum_{j\neq i}\varphi_j{}^*(\boldsymbol{x}')\varphi_j(\boldsymbol{x})V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\varphi_i(\boldsymbol{x}')d^3\boldsymbol{x}' \tag{9.3.33 b}$$

の 2 つの部分から成る．V_{E} が Hermite 型であることは容易にわかる．こうして

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\boldsymbol{x}) + V_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{x}) + V_{\mathrm{E}}(\boldsymbol{x})\right\}\varphi_i(\boldsymbol{x}) = \sum_j \omega_{ij}\varphi_j(\boldsymbol{x}) \tag{9.3.34}$$

という連立方程式が得られる．これを対角化して，左辺の演算子の固有関数をあらためて φ とおくと

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\boldsymbol{x}) + V_{\mathrm{D}}(\boldsymbol{x}) + V_{\mathrm{E}}(\boldsymbol{x})\right\}\varphi_i(\boldsymbol{x}) = \varepsilon_i\varphi_i(\boldsymbol{x}) \tag{9.3.35}$$

となる．ε_i が固有値である．(9.3.35)の式を Hartree-Fock 方程式という((9.3.35)で $V_{\rm E}(\boldsymbol{x})$ を省略した式を単に Hartree 方程式ということがある)．このときも

$$\langle E_0\rangle=\langle\Phi_0|H|\Phi_0\rangle$$
$$=\sum_{i=1}^{N}\varepsilon_i-\frac{1}{2}\sum_{i,j}\int\varphi_i^*(\boldsymbol{x})\varphi_j^*(\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\{\varphi_i(\boldsymbol{x})\varphi_j(\boldsymbol{x}')-\varphi_i(\boldsymbol{x}')\varphi_j(\boldsymbol{x})\}d^3\boldsymbol{x}d^3\boldsymbol{x}' \tag{9.3.36}$$

で，やはり粒子間相互作用エネルギーの数えすぎを補正した形になる．

Hartree の式は，1粒子状態波動関数の積の形で，できるだけ低いエネルギーになるようにする，という変分法の考えに基づいている．そのとき，1粒子波動関数 φ を変分して，これに対して系のエネルギー期待値が停留値を取るとした．$\{\varphi_i\}$ を完全系としてあらかじめ固定しておくと，1粒子波動関数はこれの線形結合として表される．φ の変分はこの線形結合の係数の変分であり，この方法でも同じ結果が得られる．後の話の都合上，Fermi 粒子系についてこのやり方を示しておく．

このときは，1粒子状態があらかじめ指定されているから，占有数表示で式を表すことにする．ハミルトニアン(9.3.28)は占有数表示で

$$H=\sum_{ij}(T_{ij}+U_{ij})c_i^\dagger c_j+\frac{1}{2}\sum_{ijkl}V_{ij,kl}c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k \tag{9.3.37}$$

である．ここで

$$\left.\begin{aligned}T_{ij}&=\int\varphi_i^*(\boldsymbol{x})\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right)\varphi_j(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x},\qquad U_{ij}=\int\varphi_i^*(\boldsymbol{x})U(\boldsymbol{x})\varphi_j(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x},\\ V_{ij,kl}&=\int\varphi_i^*(\boldsymbol{x})\varphi_j^*(\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\varphi_k(\boldsymbol{x})\varphi_l(\boldsymbol{x}')d^3\boldsymbol{x}d^3\boldsymbol{x}'\end{aligned}\right\} \tag{9.3.38}$$

である．この表示で状態 $|\Psi_0\rangle=|n_1=1,n_2=1,\cdots,n_N=1\rangle$ がエネルギーの最低値をとるようにしたい．$|\Psi_0\rangle$ の変分 $\delta|\Psi_0\rangle$ として

$$\delta|\Psi_0\rangle=\lambda c_\beta^\dagger c_\alpha|\Psi_0\rangle \tag{9.3.39}$$

を取る．α が $|\Psi_0\rangle$ ですでに占有されている状態で，β が占有されていない状態であれば

$$\delta|\Psi_0\rangle=\lambda|\cdots,n_\alpha=0,\cdots,n_N=1,\cdots,n_\beta=1,\cdots\rangle$$

であり，それ以外の場合は $\delta|\Psi_0\rangle=0$ である．すなわち，$|\Psi_0\rangle$ に対して励起した状態を変分として取ることになる．1粒子状態 φ についていえば，φ_α を $\varphi_\alpha+\lambda\varphi_\beta$ と変えたことに相当する．この変分に対して $\langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle$ の変分が0であるという条件は

$$T_{\beta\alpha}+U_{\beta\alpha}+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(V_{i\beta,i\alpha}-V_{i\beta,\alpha i}-V_{\beta i,i\alpha}+V_{\beta i,\alpha i})=0 \qquad (\alpha\leqq N,\ \ \beta>N) \tag{9.3.40}$$

となる．もし最初から c の反可換性を考慮して(9.3.37)の $V_{ij,kl}$ の代りに

$$\bar{V}_{ij,kl}=\frac{1}{4}(V_{ij,kl}-V_{ji,kl}-V_{ij,lk}+V_{ji,lk}) \tag{9.3.41}$$

を用いると

$$H=\sum(T_{ij}+U_{ij})c_i{}^{\dagger}c_j+\frac{1}{2}\sum\bar{V}_{ij,kl}c_i{}^{\dagger}c_j{}^{\dagger}c_lc_k \tag{9.3.42}$$

であり，(9.3.40)の条件は

$$T_{\beta\alpha}+U_{\beta\alpha}+2\sum_{i=1}^{N}\bar{V}_{i\beta,i\alpha}=0 \tag{9.3.43}$$

である．

ここで

$$H^{\mathrm{HF}}=\sum_{ij}\left(T_{ij}+U_{ij}+2\sum_{k=1}^{N}\bar{V}_{ki,kj}\right)c_i{}^{\dagger}c_j \tag{9.3.44}$$

によって Hartree のハミルトニアンを定義する．ただし，i,j の和はすべての状態についてとられている．(9.3.40)または(9.3.43)の条件は，$|\Psi_0\rangle$ の占有されている状態と占有されていない状態の間の H^{HF} の行列要素が0であるということである．したがって，占有された状態の間で線形結合をつくっても変分条件は変わらない．このことを利用して H^{HF} を対角化する表示を見つける．すなわち

$$T_{ij}+U_{ij}+2\sum_{k=1}^{N}\bar{V}_{ki,kj}=\epsilon_i\delta_{ij} \tag{9.3.45}$$

となるように基底 $\{\varphi_i\}$ をとり直す．(9.3.45)は(9.3.35)と同等である．このように基底をとり直した時の状態 $|\Psi_0\rangle$ での H の期待値は

$$\langle E\rangle=\langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle=\sum_{i=1}^{N}\epsilon_i-\sum_{k=1}^{N}\bar{V}_{ki,ki} \tag{9.3.46}$$

で(9.3.36)と同じであり，$\langle E\rangle$ は $|\Psi_0\rangle$ の変分に対して停留値をとっている．

変分(9.3.39)をとることは次のようにも考えられる†．状態 $|\Psi_0\rangle$ に

$$|\Psi\rangle = e^{i\lambda(S+S^\dagger)}|\Psi_0\rangle \tag{9.3.47}$$

という変換を施し，$|\Psi\rangle$ でのエネルギー期待値

$$E(\lambda) = \langle\Psi|H|\Psi\rangle \tag{9.3.48}$$

を作る．S は $c, c^\dagger$ の多項式で与えられる演算子である．S が粒子数を変えない(すなわち c と $c^\dagger$ の数が同じであるような積になっている)ような演算子であれば，$|\Psi\rangle$ は $|\Psi_0\rangle$ と同じ N 粒子系の状態である．S をいろいろに選ぶことにより，いろいろな形の $|\Psi\rangle$ を作ることができる．この $|\Psi\rangle$ を変分関数として考える．λ が変分パラメーターである．λ が微小量であるとして $E(\lambda)$ を展開すると

$$\begin{aligned} E(\lambda) &= \langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle + i\lambda\langle\Psi_0|[H, S+S^\dagger]|\Psi_0\rangle \\ &\quad + \frac{(-1)}{2}\lambda^2\langle\Psi_0|[[H, S+S^\dagger], S+S^\dagger]|\Psi_0\rangle + \cdots \\ &\equiv \langle E\rangle + \lambda\delta^{(1)}E + \lambda^2\delta^{(2)}E + \cdots \end{aligned} \tag{9.3.49}$$

となる．

$$\partial E(\lambda)/\partial\lambda|_{\lambda=0} = i\langle\Psi_0|[H, S+S^\dagger]|\Psi_0\rangle \tag{9.3.50}$$

であるから，(9.3.50)の右辺が0であれば，この変分に対して $|\Psi_0\rangle$ はエネルギー期待値の停留値を与える．S として一番簡単な形である

$$S = c_\beta{}^\dagger c_\alpha \qquad (\beta \text{は占有されている状態，} \alpha \text{は占有されていない状態}) \tag{9.3.51}$$

をとったのが(9.3.39)に相当する．容易にわかるように，$|\Psi_0\rangle$ が Hartree-Fock の意味での基底状態になっていれば(9.3.50)の右辺は0である．

S としてはいろいろなものを考えることができる．$|\Psi_0\rangle$ が Hartree-Fock の意味の基底状態であれば，$S^\dagger|\Psi_0\rangle$ は一般に $|\Psi_0\rangle$ に対して励起状態になる．しかし，$S^\dagger|\Psi_0\rangle$ は一般には H の固有状態に必ずしもならない．そこで，$S^\dagger$ としてできるだけ H の固有状態を作り出すような演算子を選ぶことができる．これが次節で述べる規準振動である．この時 $S^\dagger$ は

$$[H, S^\dagger] = \omega S^\dagger, \qquad [H, S] = -\omega^* S \tag{9.3.52}$$

† 以下の議論は沢田，福田：*Prog. Theor. Phys.*, 25, 653(1961)によっている．なお沢田克郎：『多体問題』，岩波書店に安定性の詳しい議論がある．

という関係を(一般にはある範囲の近似で)満たしている．$S, S^\dagger$ をこのようにとれば，(*9. 3. 50*)の右辺は

$$i\langle\Psi_0|\omega S^\dagger-\omega^* S|\Psi_0\rangle$$

で，S と $|\Psi_0\rangle$ の性質からこれは 0 となるのが普通である．しかし，もし S が $\langle\Psi_0|S|\Psi_0\rangle\neq 0$ あるいは $\langle\Psi_0|S^\dagger|\Psi_0\rangle\neq 0$ という性質を持っていれば，このような $S, S^\dagger$ を用いた変分に対し $|\Psi_0\rangle$ はエネルギー停留値を与えない．λ を適当に選べば，(*9. 3. 49*)の右辺の第 2 項すなわちエネルギー期待値の 1 次の変分 $\delta^{(1)}E$ が <0 となり，よりよい状態を $|\Psi_0\rangle$ として探す必要が生ずる．

仮りに $\delta^{(1)}E=0$ であっても，状態は安定であるとは限らない．そのために，(*9. 3. 49*)の展開の λ^2 の項を見てみる．$S, S^\dagger$ が(*9. 3. 52*)の関係を満たしている時には $\lambda^2\delta^{(2)}E$ は

$$\begin{aligned}-\frac{\lambda^2}{2}\langle\Psi_0|[[H, S+S^\dagger], S+S^\dagger]|\Psi_0\rangle &= -\frac{\lambda^2}{2}\langle\Psi_0|[\omega S^\dagger-\omega^* S, S+S^\dagger]|\Psi_0\rangle \\ &= \frac{\lambda^2}{2}(\omega+\omega^*)\langle\Psi_0|[S, S^\dagger]|\Psi_0\rangle\end{aligned}$$

であるから，ω が実数であっても $[S, S^\dagger]$ の値によっては正あるいは負になりうる．$\delta^{(2)}E>0$ ならば系は安定であり，$\delta^{(2)}E<0$ ならば $\delta^{(1)}E=0$ であっても系は不安定である．さらに興味があるのは ω が純虚数である場合で，この場合 $\delta^{(2)}E=0$ となり，系はこの種の変形に対してやはり不安定である．超伝導などの問題でこのような例が見られる(本講座第 7 巻『物性 II』参照)．

c) Fermi 粒子系の基底状態

Fermi 粒子系の基底状態として，まず Hartree の近似での基底状態を考える．これは，いわゆる Fermi の海である．Hartree の 1 粒子状態系 $\{\varphi_i\}$ で，状態の番号をエネルギーの低い方から順につけておくと，基底状態は

$$|\Psi_0\rangle = \prod_{i=1}^{N} c_i^\dagger|0\rangle \qquad (9.3.53)$$

で与えられる．$|0\rangle$ は粒子が 1 つもない真空，$c_i^\dagger$ は φ_i で記述される状態に粒子を 1 個作り出す生成演算子である．

Fermi 粒子系の場合，(*9. 3. 53*)で与えられる基底状態を基準にして考えることが多い．このとき，$|\Psi_0\rangle$ を $|\tilde{0}\rangle$ と書くことにする．これに対して励起状態には

$i>N$ の1粒子状態が現れ，その代りに $i\leqq N$ の1粒子状態のどれかがなくなる．これは $|\tilde{0}\rangle$ に対しては穴のあいた状態になる．つまり，$i\leqq N$ の1粒子状態を消滅させることは，$|\tilde{0}\rangle$ に対して穴の状態を作り出すことになる．そこで，粒子状態の生成・消滅演算子 $c_i^\dagger, c_i$ を，$|\tilde{0}\rangle$ に準拠して，$i>N$ と $i\leqq N$ とに分類し

$$c_i^\dagger=\begin{cases} a_i^\dagger & i>N \\ b_i & i\leqq N \end{cases} \qquad c_i=\begin{cases} a_i & i>N \\ b_i^\dagger & i\leqq N \end{cases} \tag{9. 3. 54}$$

と書くことにする．$a^\dagger, a$ は $i>N$ の粒子状態を生成・消滅させる演算子であり，$b^\dagger$ は $i\leqq N$ の粒子状態のところに穴を作り出す ($|\tilde{0}\rangle$ に対して) 演算子，b は $i\leqq N$ の粒子状態に穴があいているときにこれを消す(すなわち粒子をつめる)演算子である．Fermi 粒子系であることから

$$a_i|\tilde{0}\rangle=0, \qquad b_i|\tilde{0}\rangle=0 \tag{9. 3. 55}$$

である．

相互作用のない Fermi 粒子系では，前に述べたように，φ_i として平面波を取ることができる．このとき，$|\tilde{0}\rangle$ で占められている最高の運動量状態の運動量の大きさ $p_{\rm F}$ ($p_{\rm F}/\hbar$ が a) の $k_{\rm F}$ に相当する)を Fermi 運動量という．Fermi 運動量と粒子数 N との関係は(スピン自由度を $(2s+1)$ として)

$$N=(2s+1)\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3\frac{4\pi}{3}p_{\rm F}{}^3 \tag{9. 3. 56}$$

すなわち

$$p_{\rm F}=\hbar\left(\frac{6\pi^2}{2s+1}\right)^{1/3}\left(\frac{N}{L^3}\right)^{1/3} \tag{9. 3. 57}$$

である．

相互作用がある場合でも，Hartree の式(9. 3. 34)は，外場 $U(\boldsymbol{x})$ がない時には平行移動に対して不変であるから，1粒子状態を特徴づける量として運動量 $\boldsymbol{p}$ $(=\hbar\boldsymbol{k})$ をとることができる．$\{\varphi_i\}$ として(9. 3. 23)に相当して

$$\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar} \qquad (\Omega \text{ は規格化の体積で(9. 3. 23)の } L^3 \text{ に相当する})$$

を選ぶ．(簡単のため，ここではスピンなどは考えない．スピン座標を考慮に入れても事情は本質的に同じである．) (9. 3. 34)で $U(\boldsymbol{x})=0$ とした式を用いて，1粒子状態のエネルギー

$$\varepsilon_{\boldsymbol{p}} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{N}{\Omega}v_0 - \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{p}'} v_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'} \tag{9.3.58}$$

が得られる．(*9.3.58*) で $v_{\boldsymbol{p}}$ は粒子間相互作用 $V(\boldsymbol{x})$ の Fourier 成分

$$v_{\boldsymbol{p}} = \int V(\boldsymbol{x}) e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar} d^3\boldsymbol{x} \tag{9.3.59}$$

であり，右辺の第3項の $\sum_{\boldsymbol{p}'}$ は占められている1粒子状態 $\boldsymbol{p}'$ についての和をとる．Hartree の基底状態はこの1粒子エネルギーの低い状態から順次に粒子をつめたものに相当する．

多くの場合，運動量の小さい状態の方がエネルギーが低い．このときは運動量の小さい方から順次に1粒子状態をつめたものが基底状態となる．そのときのエネルギー (すなわち $\langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle = \langle E_0\rangle$) は

$$\begin{aligned}\langle E_0\rangle &= \sum_{\boldsymbol{p}}^{p_{\mathrm{F}}} \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}N\frac{N}{\Omega}v_0 - \frac{1}{2}\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'}^{p_{\mathrm{F}}} v_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'} \\ &= \sum_{\boldsymbol{p}}^{p_{\mathrm{F}}} \varepsilon_{\boldsymbol{p}} - \frac{1}{2}\frac{N^2}{\Omega}v_0 + \frac{1}{2}\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'}^{p_{\mathrm{F}}} v_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'}\end{aligned} \tag{9.3.60}$$

である．

こうして，相互作用のある場合でも，Fermi 粒子系の基底状態での運動量状態の分布は Fermi 運動量の付近で不連続に (あるいは不連続に近く) 変化するような形をとることが期待される．ただ，このとき一定の運動量 $\boldsymbol{p}$ の1粒子状態のエネルギーは，相互作用のない場合の値 ($=\boldsymbol{p}^2/2m$) とは異なっている．この状態の運動は見かけ上独立粒子運動をしているように記述されているが，実際は他の粒子を引きずり，あるいは押しのけながら運動をしているもので，独立粒子といっても相互作用のない場合の粒子像とは異なっている．その意味で，このような‘粒子’を一般に準粒子と名付けている．

上の議論では，1粒子状態を運動量で特徴づけることが有効である，別のいい方をすれば，相互作用のない場合の状態と相互作用のある場合の状態とが1対1に対応づけられることを暗黙の中に仮定している．しかし，相互作用の性質によっては，このような仮定が成り立たない場合がある．その時には準粒子の内容は通常の粒子とは相当異なってくる．超伝導状態などはその良い例である．このような場合にはもちろん，そうでない場合でも，Hartree の $\langle E_0\rangle$ より低いエネルギー値を基底状態に対して導き出すことは十分に可能である．

d) Thomas-Fermiの方法または局所Fermi運動量の方法

Hartreeの方法は，多Fermi粒子系の中での1粒子運動を求める方法として正攻法である．しかし，粒子数が多い場合に計算を遂行することは，電子計算機の助けを借りてもあまり簡単でない．粒子数が多いときは，むしろ逆の近似すなわち統計的な取扱いをする方が，系の性質をよく把握できることがある．Thomas-Fermiの方法はその1つで，元来は原子内の電子の運動を定めるポテンシャルを求める方法の1つとして提出されたものである．

Thomas-Fermiの方法では粒子密度をまず考える．ポテンシャルが空間的な位置だけの関数であるとすれば，ポテンシャル・エネルギー密度は粒子密度とポテンシャルとで定められる．ちょうど古典的な静電場でポテンシャル・エネルギー密度が電荷密度とポテンシャルの積の半分で与えられるのと対応している．一方，運動エネルギー密度も粒子密度だけの関数であると仮定する．これは，場の変化がゆっくりしているときに良い近似となる．

密度が一様であれば，系の基底状態はFermi運動量までの運動量状態が占められた状態である．もし密度の変化がゆるやかであれば，ある小さな領域をとってその領域内で密度が一定であると考えてよいであろう．そうすると，その密度に対してFermi運動量を考えることができる．この領域が十分小さくはあるが密度の概念が成り立つほどには大きく選べるとすれば，空間の各点に対してFermi運動量$p_{\mathrm{F}}(\boldsymbol{x})$を定義することができる．密度$\rho(\boldsymbol{x})$と$p_{\mathrm{F}}(\boldsymbol{x})$の関係は，粒子のスピンが1/2であるとすれば

$$\rho(\boldsymbol{x})=\frac{1}{3\pi^2}\left(\frac{p_{\mathrm{F}}(\boldsymbol{x})}{\hbar}\right)^3 \tag{9.3.61}$$

で与えられる．運動エネルギー密度は

$$\epsilon_k(\boldsymbol{x})=2\cdot\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\frac{p^2}{2m}d^3\boldsymbol{p}=\frac{3}{10m}p_{\mathrm{F}}{}^2(\boldsymbol{x})\rho(\boldsymbol{x})=\frac{3\hbar^2}{10m}(3\pi^2)^{2/3}\rho^{5/3}(\boldsymbol{x}) \tag{9.3.62}$$

である．

系が平衡状態にあれば，系の各点で粒子のとりうる最高エネルギーは場所によらず一定でなければならない．なぜなら，もしそうでなければ，粒子はより低いエネルギー値をとりうるところへ移動してしまうからである．この条件は

$p_F{}^2(\boldsymbol{x})/2m+V(\boldsymbol{x})=$一定，すなわち

$$\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2)^{2/3}(\rho(\boldsymbol{x}))^{2/3}+V(\boldsymbol{x}) = \text{一定} \tag{9.3.63}$$

と書ける．原子内の電子に対してはこの条件は次のようになる．電子の運動する静電ポテンシャルを $\phi(\boldsymbol{x})$ として

$$\frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2)^{2/3}(\rho(\boldsymbol{x}))^{2/3}-e\phi(\boldsymbol{x}) = \text{定数}. \tag{9.3.64}$$

右辺の定数を $-e\phi_0$ (ϕ_0 は正数) とおく (ϕ_0 が正であるのは電子が原子内に束縛されていることからくる)．静電ポテンシャル $\phi(\boldsymbol{x})$ は電荷密度 $-e\rho(\boldsymbol{x})$ と Poisson 方程式

$$\Delta\phi(\boldsymbol{x}) = 4\pi e\rho(\boldsymbol{x})$$

によって関係づけられる．これから $\phi(\boldsymbol{x})$ に対する方程式

$$\Delta\phi(\boldsymbol{x}) = e(2me)^{3/2}(1/3\pi^2\hbar^3)(\phi(\boldsymbol{x})-\phi_0)^{3/2} \tag{9.3.65}$$

が得られる．中性原子に対しては遠方で $\phi=0$ であるから，$\phi_0=0$ である．密度分布を球対称であるとし

$$\phi(\boldsymbol{x}) = \frac{Ze}{|\boldsymbol{x}|}\chi(x), \qquad x = \frac{2me^2}{\hbar^2}Z^{1/3}|\boldsymbol{x}| \tag{9.3.66}$$

と置くと，(9.3.65) は次のようになる．

$$\sqrt{x}\,\chi''(x) = \frac{4\pi}{3}[\chi(x)]^{3/2}. \tag{9.3.67}$$

境界条件は $\chi(0)=1$ (すなわち $|\boldsymbol{x}|$ の小さいところで $\phi(\boldsymbol{x})\cong Ze/|\boldsymbol{x}|$)，$\chi(\infty)=0$ である．この方程式は数値的に解くことができ，$\chi(x)$ の表が作られている．

上の考察では，ρ に対する方程式を導出するのに，Poisson の方程式を利用した．これに相当する式がない場合には，ほかの方法を用いなければならない．たとえば，粒子間相互作用の知識をもとにして適当な方法でポテンシャル・エネルギー密度 W が粒子密度の関数として求められるならば，系の全エネルギーを $\int W(\rho)\rho(\boldsymbol{x})d^3\boldsymbol{x}$ あるいはこれに類似の式で与えることができる．このとき全エネルギーが最小になるように ρ を変分することにより，ρ に対する方程式が得られる．ρ に対する方程式を導くための仮定あるいは方法と，Thomas-Fermi の方法の基本的な考え方とは，切り離して考えることができるので，他のいろいろな仮定や近似と組み合わせて有用に用いることができる．

e) Bose 粒子系の基底状態

Bose 粒子系の 1 つの代表例は光子集団であるが，特別な条件下でなければ，一般には粒子数は保存されない．Bose 粒子系の場合，とくに他種粒子との相互作用が考慮されているときには，粒子数が保存されないのが普通である．その意味で，系の粒子数が固定されていることを暗黙の中に仮定してきたこれまでの話の枠に入りきれない面を持っている．場合によっては，占有数表示ではなく，次章で述べられるコヒーレント状態による表示の方が物理的イメージに合うこともある．しかし，一方では粒子数が一定の Bose 粒子系も存在するし(たとえば ^{4}He 流体)，また占有数表示は粒子数が変化する場合に便利な表示でもあるので，これまでの枠組を利用することとする．

相互作用のある Bose 粒子系でも，系が並行移動に対して不変ならば，運動量で粒子状態を識別することができる．相互作用が弱い斥力であれば，たいていの場合，運動量 0 の粒子状態が最低エネルギーの 1 粒子状態となり，このエネルギーを Hartree 方程式を用いて計算することができる．Hartree の意味での系の基底状態は，すべての粒子がこの 1 粒子状態を占めたものになる．系の波動関数は，この 1 粒子波動関数(すなわち，運動量 0 の平面波)の積で与えられるので，空間的には密度が一様になる傾向がある．しかし，Fermi 粒子系の場合と同じく，Hartree 近似が系の最低エネルギーを与えるとは限らず，すべての粒子が同一の Hartree 的 1 粒子状態を占める状態が良い基底状態を与えるとは限らない．その簡単な例を以下に示す．

相互作用ハミルトニアンを

$$H_\mathrm{I}=\frac{1}{2}\sum_{kpq}V_k c_{p+k}{}^\dagger c_{q-k}{}^\dagger c_q c_p \tag{9.3.68}$$

とする．V_k は 2 粒子間相互作用 $V(\boldsymbol{x})$ の Fourier 成分である．$V(\boldsymbol{x})$ が短距離力であれば，これを δ 関数で近似して，V_k＝定数＝V_0 と置くことができる．H_I の対角成分は

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}V_0\left(\sum_p n_p(n_p-1)+2\sum_{\substack{p,q\\p\neq q}}n_p n_q\right)&=\frac{1}{2}V_0\left(2\sum_{p,q}n_p n_q-\sum_p n_p(n_p+1)\right)\\&=\frac{1}{2}V_0\left(2N^2-N-\sum_p n_p{}^2\right)\end{aligned} \tag{9.3.69}$$

である．ただし $n_p=c_p{}^\dagger c_p$ は数演算子で，N は系の全粒子数である．

相互作用が強いとして運動エネルギーを無視すれば(あるいは粒子の質量が十分重いとすれば)，(9.3.69)の極小値は，V が引力の場合には，すべての $n_p=0$ または1の場合に得られる．すなわち，系は Fermi 粒子系に似て，粒子はできるだけ同じ運動量状態をとらないようにしようとする．しかし，V が斥力であれば，n_p のどれかが N で他が0という場合が(9.3.69)の最小値を与え，1つの粒子状態をすべての粒子が占めることとなる．

上の例は少し極端すぎるので，もう少し現実に近い(といっても単純化されているが)例を挙げておく．これは ^{4}He 流体の性質の一部を単純化した模型である†．

相互作用のある Bose 粒子系のハミルトニアンを

$$H = H_0+H_\mathrm{I} = \sum_p \epsilon_p c_p{}^\dagger c_p+\frac{1}{2}\sum_{kpq} V_k c_{p+k}{}^\dagger c_{q-k}{}^\dagger c_q c_p \tag{9.3.70}$$

と書く．相互作用がなければ，$p=0$ の状態をすべての粒子が占めている．相互作用があるので，すべての粒子が $p=0$ の状態を占めるとは限らないであろう．しかし，相互作用が弱い場合には，$p=0$ の状態を大部分の粒子が占めると予想される．$p=0$ の状態にある粒子数を N_0 とし，これが系の総粒子数 N とあまり変わらない $(1-(N_0/N)\ll 1)$ と仮定する．系の基底状態を $|\Psi_0(N_0)\rangle$ と書くと，$c^\dagger, c$ の性質から

$$\begin{aligned} c_0{}^\dagger|\Psi_0(N_0)\rangle &= \sqrt{N_0+1}\,|\Psi_0(N_0+1)\rangle \\ c_0|\Psi_0(N_0)\rangle &= \sqrt{N_0}\,|\Psi_0(N_0-1)\rangle \end{aligned} \tag{9.3.71}$$

と書ける．$|\Psi_0(N_0\pm 1)\rangle$ は $p=0$ 状態の粒子が1個多い(少ない)状態である．N, N_0 が十分大きければ，$\sqrt{N_0\pm 1}\cong\sqrt{N_0}$ であり，$|\Psi_0(N_0\pm 1)\rangle$ は $|\Psi_0(N_0)\rangle$ とあまり変わらないと考えてよいであろう．もしこういう近似をとり，$\sqrt{N_0+1}$ を $\sqrt{N_0}$ で置きかえ，$|\Psi_0(N_0\pm 1)\rangle$ を $|\Psi_0(N_0)\rangle$ で置きかえると，$c_0{}^\dagger, c_0$ は単に $\sqrt{N_0}$ をかけるだけの演算子で，c数として扱ってよい．$p=0$ の状態については，その粒子数 N_0 が非常に大きいので，粒子数のゆらぎによる性質の変化は無視できると考えるのである．

このような近似をとると，粒子数は保存されない．すなわち，$N=\sum_p c_p{}^\dagger c_p$

† その物理的意味などは本講座第6巻『物性 I』，第7巻『物性 II』を参照されたい．

$\left(=\sum_{p\neq 0}' c_p^\dagger c_p+N_0\right)$ は H と可換でなくなる．このことは，相互作用の中に（$\sum_{kpq}$ で $p=q=0$ の項だけ取り出すと）$1/2\sum_k V_k N_0 c_k^\dagger c_{-k}^\dagger$ というような粒子数を保存しない項が現れることからもわかる．そこで粒子数が厳密に保存されることをあきらめて，粒子数が平均として保存されるという立場を取る．そのために，ハミルトニアンに $-\mu\sum_{p\neq 0}' c_p^\dagger c_p$ という項を付け加える．μ は Lagrange の未定係数で，ここでは化学ポテンシャルの役をしている．全粒子数演算子はもともとは $\sum_p c_p^\dagger c_p$ であったので，粒子数を平均として保存させる立場を取るときは $-\mu\sum c_p^\dagger c_p$ をハミルトニアンに付け加えるのが普通の処方である．しかし，今の場合は $c_0^\dagger, c_0$ を c 数として扱い，$N_0=c_0^\dagger c_0$ を定数として扱っているので，数演算子は $\sum_p c_p^\dagger c_p$ より $\sum_{p\neq 0}' c_p^\dagger c_p$ の方が適当である（N_0 の変化による系のエネルギー変化は別に考える）．そこで

$$H' = H-\mu\sum_p' c_p^\dagger c_p \tag{9.3.72}$$

を新しいハミルトニアンとする．右辺の第2項の $\sum'$ は添字が0であるような量は和に加えないことを示す．以下とくに断らなければ $\sum'$ はこの意味の和である．(9.3.72) を書き直すと

$$\begin{aligned}
H' &= H_1+H_2+\frac{1}{2}N_0^2 V_0,\\
H_1 &= \sum_p'(\epsilon_p+N_0V_0+N_0V_p-\mu)c_p^\dagger c_p+\frac{1}{2}\sum_p' N_0V_p(c_{-p}^\dagger c_p^\dagger+c_pc_{-p}),\\
H_2 &= \sum_{pk}'\sqrt{N_0}V_k(c_{p+k}^\dagger c_kc_p+c_{p+k}^\dagger c_{-k}^\dagger c_p)+\frac{1}{2}\sum_{kpq}' V_kc_{p+k}^\dagger c_{q-k}^\dagger c_qc_p
\end{aligned} \tag{9.3.73}$$

となる．（上の計算では $V_k=V_{-k}$ としている．$V(\boldsymbol{x})$ が $|\boldsymbol{x}|$ の関数である時はこうなる．）H_1 の $c_p^\dagger c_p$ の係数を ε_p と置くと

$$\varepsilon_p = \epsilon_p+N_0V_0+N_0V_p-\mu \tag{9.3.74}$$

は Hartree-Fock 近似での1粒子エネルギーである．（$N\cong N_0$ という近似をしている．）化学ポテンシャル μ と N_0 とは次の条件で定められる．まず，系の全粒子数の平均値が与えられた数 N に等しいことから

$$N = N_0+\langle\Psi_0|\sum' c_p^\dagger c_p|\Psi_0\rangle \tag{9.3.75}$$

また，$|\Psi_0\rangle$ での H' の平均値 E_0' は，

$$E_0' = E_0 - \mu\langle\Psi_0|\sum{}' c_p{}^\dagger c_p|\Psi_0\rangle$$
$$= E_0 - \mu(N - N_0) \qquad (E_0 = \langle\Psi_0|H|\Psi_0\rangle)$$

であるが，これが N の変化に対し停留値を取ることから

$$\mu = \partial E_0/\partial N. \tag{9.3.76 a}$$

また，N_0 の変分に対しては ($\partial E_0/\partial N_0 = 0$ であるから)

$$\mu = \partial E_0'/\partial N_0 \tag{9.3.76 b}$$

とも書ける.

H_1 の右辺の第 2 項の和は，元来は $H_{\rm I}$ の中の $c_0c_0c_{-p}{}^\dagger c_p{}^\dagger$ や $c_0{}^\dagger c_0{}^\dagger c_pc_{-p}$ の形の項から来たもので，これは運動量状態 $\boldsymbol{p}$ の粒子と $-\boldsymbol{p}$ の粒子の対が運動量状態 $\boldsymbol{p}=0$ の粒子対から発生するか，あるいはこの粒子対に移る，という相互作用を表している．粒子間相互作用の形にもよるが，一定の関係にある(今の場合は運動量の和が 0 になるような)粒子対が強く結合するという例はよくある．この粒子対が他の同様な粒子対に(粒子間の関係を保ちながら)移るような相互作用がこの場合重要になる．今の場合には，運動量状態 $\boldsymbol{p}=0$ の粒子したがってその状態の粒子対が多いので，その粒子対からまたはその粒子対への他粒子対の移行が相互作用の中で主要な項であると考えられる．そうすると(相互作用 V があまり強くないとして) H_2 は H_1 に比べて小さいと仮定してよいであろう．そこでまず H_1 を対角化することを考える．その際，運動量 $\boldsymbol{p}$ の粒子と運動量 $-\boldsymbol{p}$ の粒子が結合することを考慮に入れ，Bogoliubov に従って新しい演算子 $\alpha_p, \alpha_p{}^\dagger$ を次のように定義する.

$$\left.\begin{aligned} \alpha_p &= u_pc_p + v_pc_{-p}{}^\dagger \\ \alpha_p{}^\dagger &= u_pc_p{}^\dagger + v_pc_{-p} \end{aligned} \quad \text{または} \quad \begin{aligned} c_p &= u_p\alpha_p - v_p\alpha_{-p}{}^\dagger \\ c_p{}^\dagger &= u_p\alpha_p{}^\dagger - v_p\alpha_{-p} \end{aligned}\right\} \tag{9.3.77}$$

ただし，u, v は実の数で

$$u_p{}^2 - v_p{}^2 = 1, \qquad u_{-p} = u_p, \qquad v_{-p} = v_p \tag{9.3.78}$$

という条件を満たすものとする.

演算子 $\alpha, \alpha^\dagger$ は

$$[\alpha_p, \alpha_{p'}{}^\dagger] = \delta_{pp'}, \qquad [\alpha_p, \alpha_{p'}] = [\alpha_p{}^\dagger, \alpha_{p'}{}^\dagger] = 0 \tag{9.3.79}$$

という交換関係を満足するので，Bose 粒子を生成・消滅させる演算子の性格を持っている．この変換により H_1 が対角型になるように係数 u, v を定める．この変換を行い，H_1 の中で $\alpha^\dagger\alpha^\dagger, \alpha\alpha$ の形の項の係数が 0 になるという条件から

$$\left.\begin{aligned} u_p^{\ 2} &= \frac{1}{2}[1+\sqrt{\varepsilon_p^{\ 2}/(\varepsilon_p^{\ 2}-N_0^{\ 2}V_p^{\ 2})}] \equiv \frac{1}{2}[1+\varepsilon_p/\bar{\varepsilon}_p] \\ v_p^{\ 2} &= \frac{1}{2}[-1+\sqrt{\varepsilon_p^{\ 2}/(\varepsilon_p^{\ 2}-N_0^{\ 2}V_p^{\ 2})}] \equiv \frac{1}{2}[-1+\varepsilon_p/\bar{\varepsilon}_p] \\ \bar{\varepsilon}_p^{\ 2} &= \varepsilon_p^{\ 2}-N_0^{\ 2}V_p^{\ 2} \end{aligned}\right\} \qquad (9.3.80)$$

であればよいことがわかる．また H_1 は

$$H_1 = \sum{}'\left[\bar{\varepsilon}_p\alpha_p{}^\dagger\alpha_p+\frac{1}{2}(\bar{\varepsilon}_p-\varepsilon_p)\right] \qquad (9.3.81)$$

となる．化学ポテンシャル μ は

$$\mu = N_0V_0$$

となるので，$\varepsilon_p=\epsilon_p+N_0V_p$ であり

$$\bar{\varepsilon}_p^{\ 2} = \epsilon_p^{\ 2}+2\epsilon_pN_0V_p \qquad (9.3.82)$$

となる．

(9.3.81)はエネルギー $\bar{\varepsilon}_p$ の自由 Bose 粒子集団のハミルトニアンであり，$\bar{n}_p=\alpha_p{}^\dagger\alpha_p$ がその粒子の数演算子である．この Bose 粒子は，運動量 $\boldsymbol{p}$ で識別されてはいるが，もとの粒子とは異なっているので，一種の‘準粒子’である．もとの粒子間相互作用が斥力であれば，$\boldsymbol{p}=0$ に対する $\bar{\varepsilon}_p$ が最低の粒子エネルギーである．したがって，H_2 を無視する近似では，すべての準粒子が $\boldsymbol{p}=0$ の状態にある配位が系の基底状態を与える．このとき，H' の基底エネルギーは

$$E_0 = \frac{1}{2}N_0^{\ 2}V_0+\frac{1}{2}\sum{}'(\bar{\varepsilon}_p-\varepsilon_p) \qquad (9.3.83)$$

となり，Hartree 近似での基底エネルギーより低くなる．

基底状態で $\boldsymbol{p}=0$ の状態を占めるもとの粒子の数 N_0 は(9.3.75)の $|\Psi_0\rangle$ として上に得られた状態をとって

$$N_0 = N-\sum{}'v_p^{\ 2}$$

となる．いいかえれば，この基底状態でのもとの粒子の運動量分布は $v_p^{\ 2}$ である $(\boldsymbol{p}\neq 0)$．v_p の形は相互作用 V_p によるが，よほど特殊な相互作用でない限り，$|\boldsymbol{p}|$ を大きくすれば v_p は 0 に近づくのが普通である．しかし，$\boldsymbol{p}\neq 0$ に対して v_p は 0 ではない．すなわち，相互作用のある場合には，基底状態でも，すべての粒子が $\boldsymbol{p}=0$ の状態を占めるようにはなっていない．

§9.4　多粒子系の運動と状態II——集団運動

多粒子系で基底状態の性質とともに重要なのは，励起状態の性質および励起のメカニズムである．言いかえれば，運動の形態がどうなっているか，ということである．粒子の種類や相互作用の性質により，多粒子系の運動はさまざまな様相を示す．粒子間の相互作用がひじょうに弱ければ，個々の粒子の運動は自由運動に近く，系の励起は個々の粒子の運動状態の変化が主で，他粒子からの力はこれに対する補正として働くにすぎない．前節で扱った Hartree 近似や準粒子の考え方は，系の運動の中でできるだけ独立粒子運動をひき出そうとするものである(そのために最初に考えていた粒子と異なる‘粒子’の集合として系を考えることになる場合もある)．この時の励起はいわゆる単一粒子励起である．

相互作用が弱くない場合には，個々の粒子の運動は独立な自由運動からは程遠く，これを正確に求めるのは必ずしも容易ではない．他に粒子が多数存在するために1粒子運動がどのように変化するかは興味ある問題ではあるが，多粒子系で特に興味があり物理的にも重要であるのは，多数粒子が適当に位相を揃えて運動することによって生ずる系全体としての運動，すなわち，**集団運動**(collective motion)である．

a)　規準振動——調和振動子の例

多粒子系の集団運動と励起メカニズムとしてよく知られている例は，結合した振動子系の規準振動であろう．いくつかの相異なる振動数の振動子が結合した系では，それぞれの振動子の振動数とは異なった振動数を持つ系全体としての振動が発生する．このときにこの振動を記述する座標は，一般にはすべての振動子の座標に関係してくる．この振動が規準振動であり，座標が規準座標である．そこで，この規準振動の求め方は，集団運動形態の求め方の1つの典型的な例となる．

それと同時に，この例は Bose 粒子系の集団運動の代表的な例でもある．角振動数 ω の1次元調和振動子の固有状態は量子数 n で与えられ，そのエネルギーは $\hbar\omega(n+1/2)$ である．これはエネルギー $\hbar\omega$ の運動モードが n 個励起されている状態である．この運動モードを粒子と呼ぶならば，調和振動子は運動状態が1種類で粒子数が不定の Bose 粒子系と同等である．結合した振動子系は，相互作用のある Bose 粒子系に対応する．

角振動数が ω で単位質量の1次元調和振動子のハミルトニアンを

$$H=\frac{1}{2}(p^2+\omega^2q^2) \tag{9.4.1}$$

とする．q が振動子の座標，p はこれに共役な運動量である．ここで

$$Q_\pm = q\pm i\frac{p}{\omega} \tag{9.4.2}$$

という量を定義すると

$$[H, Q_\pm] = \mp\hbar\omega Q_\pm \tag{9.4.3}$$

という関係が成り立つ．(9.4.3)は

$$\dot{Q}_\pm = \frac{1}{i\hbar}[Q_\pm, H] = \mp i\omega Q_\pm \tag{9.4.4}$$

すなわち，$Q_\pm \propto e^{\mp i\omega t}$ で，$Q_\pm$ が定常運動をしていることを示している．

状態を振動の量子数 n で識別して $|n\rangle$ と表せば，$Q_\pm$ の行列要素は容易に求められ，

$$\left.\begin{aligned}\langle n+1|Q_-|n\rangle &= \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega}}\sqrt{n+1}\\ \langle n-1|Q_+|n\rangle &= \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega}}\sqrt{n}\end{aligned}\right\} \tag{9.4.5}$$

である．§9.2の式と比べて

$$Q_- = \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega}}c^\dagger, \qquad Q_+ = \sqrt{\frac{2\hbar}{\omega}}c \tag{9.4.6}$$

と置くと，$c^\dagger, c$ は生成・消滅演算子と同じ行列要素を持つ．さらに，p, q の交換関係から

$$[c, c^\dagger] = 1 \tag{9.4.7}$$

であるから，$c^\dagger, c$ を生成・消滅演算子と考えることができる．$c^\dagger$ は量子数を1つ増す，すなわち振動を1つ励起する演算子であり，c は量子数を1つ減らす，すなわち振動を1つ消滅させる演算子である．$c^\dagger, c$ を用いて H は

$$H = \hbar\omega\left(c^\dagger c+\frac{1}{2}\right) \tag{9.4.8}$$

となる．数演算子 $n=c^\dagger c$ の固有値が振動の量子数に等しい．(9.4.3)は

$$[H, c^\dagger] = \hbar\omega c^\dagger, \qquad [H, c] = -\hbar\omega c \tag{9.4.9}$$

である．これが，振動を生成または消滅させる演算子の運動方程式である．

振動数がそれぞれ ω_i $(i=1, 2, \cdots)$ であるような振動子の集まりを考えるときには，ハミルトニアンは

$$H_0 = \sum_i \hbar\omega_i\left(c_i^\dagger c_i + \frac{1}{2}\right) \qquad (9.4.10)$$

である．$c_i^\dagger, c_i$ は振動数 ω_i の振動を生成または消滅させる演算子で

$$[c_i, c_j^\dagger] = \delta_{ij}, \qquad [c_i, c_j] = [c_i^\dagger, c_j^\dagger] = 0 \qquad (9.4.11)$$

という交換関係を満たしている．(9.4.9) に対応して

$$[H_0, c_i^\dagger] = \hbar\omega_i c_i^\dagger, \qquad [H_0, c_i] = -\hbar\omega_i c_i \qquad (9.4.12)$$

が $c_i, c_i^\dagger$ の運動方程式である．系の状態は $|n_1, n_2, \cdots\rangle$ で表される．n_i は振動数 ω_i の振動が励起されている数（量子数）である．系の基底状態はすべての振動が励起されていない状態 $|0, 0, \cdots\rangle$ で，これを $|0\rangle$ と表すと，励起状態は $c_{i_1}^\dagger c_{i_2}^\dagger \cdots |0\rangle$ の形で与えられる．このとき励起のモード，すなわち系の運動形態は振動数 ω_i の振動であり，各振動は互いに独立に励起される．励起状態はもちろん系の固有状態である．

次に，振動子が結合している場合を考える．結合を与える相互作用ハミルトニアンは，座標表示で書けば一般には $f(q_1, q_2, \cdots)$ という形で書けるであろう（q_i は i 番目の振動子座標である）．結合があまり強くないとして，各振動子の平衡点のまわりで f を展開すると，振動子の結合を与える最初の項は $\sum_{i,j} f_{ij} q_i q_j$ の形であるから，相互作用としてこれだけを取ることにする．各振動子の対称性を考慮して相互作用ハミルトニアンを

$$H_\mathrm{I} = \frac{1}{2} v \sum_{i,j} q_i q_j \qquad (v \text{ は定数}) \qquad (9.4.13)$$

と置く．$c_i^\dagger, c_i$ で表すと

$$H_\mathrm{I} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_i v_j (c_i^\dagger + c_i)(c_j^\dagger + c_j) \qquad (9.4.14)$$

$$v_i = (v\hbar/2\omega_i)^{1/2}$$

となる．(9.4.10) の H_0 と併せて

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_\mathrm{I} \\ &= \sum_i \hbar\omega_i\left(c_i^\dagger c_i + \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\sum_{i,j} v_i v_j (c_i^\dagger + c_i)(c_j^\dagger + c_j) \end{aligned} \qquad (9.4.15)$$

が結合した振動子系のハミルトニアンである．この H について規準振動を求め

る．規準振動 α が得られたとすれば，これを生成・消滅させる演算子 $A_\alpha{}^\dagger, A_\alpha$ が存在し，それは(9. 4. 9)や(9. 4. 12)のように

$$[H, A_\alpha{}^\dagger] = \hbar\omega_\alpha A_\alpha{}^\dagger, \qquad [H, A_\alpha] = -\hbar\omega A_\alpha \tag{9. 4. 16}$$

という式を満たすはずである．A が c の線形結合で与えられると仮定して(9. 4. 16)を解いてみよう．なお，ここでは実際の振動という意味で ω を実数であると考えている．一般論としては ω に複素数を許してよい．そのときは，(9. 4. 16)の代りに

$$[H, A_\alpha{}^\dagger] = \hbar\omega_\alpha A_\alpha{}^\dagger, \qquad [H, A_\alpha] = -\hbar\omega^* A_\alpha \tag{9. 4. 16$'$}$$

を考えることになる．

A として次の形を仮定する：

$$A_\alpha{}^\dagger = \sum_i X_\alpha{}^i c_i{}^\dagger, \qquad A_\alpha = \sum_i X_\alpha{}^i c_i. \tag{9. 4. 17}$$

係数 X は実であるとしておく．$c_i, c_i{}^\dagger$ の交換関係を用いて(9. 4. 16)の左辺を計算すると

$$[H, A_\alpha{}^\dagger] = \sum_i \hbar\omega_i X_\alpha{}^i c_i{}^\dagger + \sum_{i,j} v_i v_j X_\alpha{}^j c_i{}^\dagger + \sum_{i,j} v_i v_j X_\alpha{}^j c_i$$

および，これと Hermite 共役な式が得られる．ここで，もう一度 H との交換子を作ると

$$[H, [H, A_\alpha{}^\dagger]] = [H, \hbar\omega_\alpha A_\alpha{}^\dagger] = (\hbar\omega_\alpha)^2 A_\alpha{}^\dagger \tag{9. 4. 18}$$

となるが，上式の左辺は

$$[H, [H, A_\alpha{}^\dagger]] = \sum_i (\hbar\omega_i)^2 X_\alpha{}^i c_i{}^\dagger + \sum_{i,j} v_i v_j X_\alpha{}^j (\hbar\omega_i + \hbar\omega_j) c_i{}^\dagger + \sum_{i,j} v_i v_j X_\alpha{}^j (\hbar\omega_j - \hbar\omega_i) c_i.$$

同様にして

$$[H, [H, A_\alpha]] = \sum_i (\hbar\omega_i)^2 X_\alpha{}^i c_i + \sum_{i,j} v_i v_j X_\alpha{}^j (\hbar\omega_i + \hbar\omega_j) c_i + \sum_{i,j} v_i v_j X_\alpha{}^j (\hbar\omega_j - \hbar\omega_i) c_i{}^\dagger$$

が得られる．

(9. 4. 18)およびこれと Hermite 共役の式から

$$\sum_i X_\alpha{}^i \{(\hbar\omega_\alpha)^2 - (\hbar\omega_i)^2\} c_i{}^\dagger = \sum_{i,j} v_i v_j X_\alpha{}^j (\hbar\omega_j + \hbar\omega_i) c_i{}^\dagger + \sum_{i,j} v_i v_j X_\alpha{}^j (\hbar\omega_j - \hbar\omega_i) c_i,$$

$$\sum_i X_\alpha{}^i \{(\hbar\omega_\alpha)^2 - (\hbar\omega_i)^2\} c_i = \sum_{i,j} v_i v_j X_\alpha{}^j (\hbar\omega_j - \hbar\omega_i) c_i{}^\dagger + \sum_{i,j} v_i v_j X_\alpha{}^j (\hbar\omega_j + \hbar\omega_i) c_i.$$

この両式を辺々加えて

$$\sum_i X_\alpha{}^i\{(\hbar\omega_\alpha)^2-(\hbar\omega_i)^2\}(c_i{}^\dagger+c_i)=2\sum_{i,j}v_iv_jX_\alpha{}^j\hbar\omega_j(c_i{}^\dagger+c_i)$$

という式が得られる．この式は各 i について独立に成り立つはずであるから，

$$X_\alpha{}^i=2\sum_j\frac{v_iv_jX_\alpha{}^j\hbar\omega_j}{(\hbar\omega_\alpha)^2-(\hbar\omega_i)^2} \qquad (9.4.19)$$

という X に対する連立方程式が得られる．両辺に $v_i\hbar\omega_i$ をかけて i で和をとると

$$\sum_i v_i\hbar\omega_iX_\alpha{}^i=2\sum_i\frac{v_i{}^2\hbar\omega_i}{(\hbar\omega_\alpha)^2-(\hbar\omega_i)^2}\left(\sum_j v_j\hbar\omega_jX_\alpha{}^j\right)$$

すなわち

$$1=2\sum_i\frac{v_i{}^2\hbar\omega_i}{(\hbar\omega_\alpha)^2-(\hbar\omega_i)^2} \qquad (9.4.20)$$

という分散式が得られる．この式の根 $\hbar\omega_\alpha$ が規準振動のエネルギーであり，各 $\hbar\omega_\alpha$ に対して(9.4.19)を解いて得られる $X_\alpha{}^i$ を用いて $A_\alpha{}^\dagger, A_\alpha$ が求められる．(9.4.20)はまた(9.4.14)から

$$1=v\sum_i\frac{1}{\omega_\alpha{}^2-\omega_i{}^2} \qquad (9.4.20')$$

とも書ける．$v\sum_i 1/(\omega^2-\omega_i{}^2)$ を ω^2 の関数として表すと，v の正負に応じて図9.2(a), (b)の曲線になる．これが値1を取るときの ω^2 の値が根 $\omega_\alpha{}^2$ である．$v>0$ のときには，各 $\omega_i{}^2$ より大きいところに根 $\omega_\alpha{}^2$ が得られる．v が大きくなると最大の根はずっと離れた高いところに現れる．$v<0$ のときには，各 $\omega_i{}^2$ より小さいところに根が出るが，$|v|$ が大きくなると最小の根は $\omega^2<0$ のところに現れることになる．ω_α を実と仮定したので，これは解から一応除外される．しかし，

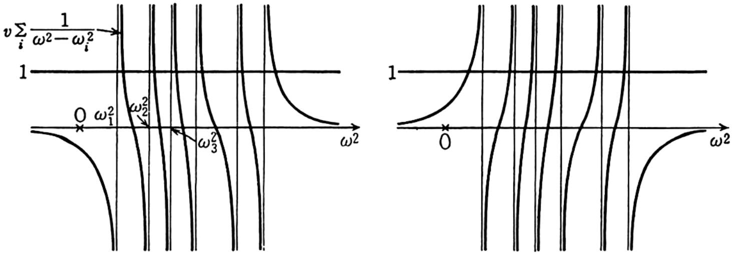


図9.2　関数 $v\sum_i 1/(\omega^2-\omega_i{}^2)$

(9. 4. 16′)の式から出発しても ω_α が純虚数であれば上の議論はそのまま使えるので，$\omega^2<0$ に現れる根も解に含めることができる．これは振動としては減衰する振動を与えることになり，そのような励起は不安定である．さらに，この場合は§9. 3 b)に述べたように，この $A^\dagger$ で与えられる変形に対して Hartree の基底状態は不安定になる．

$A, A^\dagger$ の定義から

$$[A_\alpha, A_\beta]=[A_\alpha{}^\dagger, A_\beta{}^\dagger]=0 \tag{9. 4. 21 a}$$

であるが，固有値方程式(9. 4. 19)の解 $\{X_\alpha{}^i\}$ の直交性から $[A_\alpha, A_\beta{}^\dagger]=0\ (\alpha\neq\beta)$ であるので X を適当に規格化して

$$[A_\alpha, A_\beta{}^\dagger]=\delta_{\alpha\beta} \tag{9. 4. 21 b}$$

とできる．このことは，$A_\alpha{}^\dagger, A_\beta{}^\dagger\ (\alpha\neq\beta)$ が互いに独立な運動モードを励起する演算子であることを示している．

上記の例は振動子の集合についてのものであるが，励起状態およびそのような励起を与える運動モードを求める1つの方法を示している．すなわち，(9. 4. 16)の形の方程式を満足する生成演算子 $A_\alpha{}^\dagger$ を見い出すことができれば $A_\alpha{}^\dagger|0\rangle$ は励起状態を与え，励起エネルギーが $\hbar\omega_\alpha$ となる．この方法は，**規準座標の方法**または**運動方程式の方法**と呼ばれ，多粒子系の運動モードを探る有力な方法である．上の例のように正確に規準振動が求められる場合はよいが，一般には近似的にしか求められないことが多い．後に述べる例はその1つであるが，近似の良否は系の状態や力の性質により，一般論で律することは困難である．

b) 規準振動——Fermi 粒子系の例

Fermi 粒子系の励起状態を考えるのに，基底状態として Hartree の意味での基底状態 $|\Psi_0\rangle$ ((9. 3. 53)) から出発する．§9. 3 c) と同様，この状態を $|\tilde{0}\rangle$ とし，粒子の生成・消滅演算子として $c, c^\dagger$ あるいは $a, a^\dagger, b, b^\dagger$ の表示を用いる．

1粒子が $i\leqq N$ の状態から励起されて $j>N$ の状態に移っている状態は

$$a_j{}^\dagger b_i{}^\dagger|\tilde{0}\rangle \tag{9. 4. 22}$$

で与えられる．これは1粒子励起状態である．粒子間相互作用がなければ(あるいは，Hartree の近似では)，この状態はもちろん定常な状態である．粒子状態 i のエネルギーを ε_i とすれば，(9. 4. 22)で与えられる励起状態のエネルギーは $\varepsilon_j-\varepsilon_i$ である．この状態は (i, j) の対で規定されているが，i と j との間に一定の

相関があればその相関を与える量で規定することもできる．たとえば，粒子状態が粒子の運動量で特徴づけられているとし，i, j をそれぞれ運動量 $\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{p}_j$ の状態とする．このとき $\boldsymbol{p}_j - \boldsymbol{p}_i = \boldsymbol{k}$ として，$\boldsymbol{k}$ が一定であるような (i, j) の対は，運動量遷移が $\boldsymbol{k}$ であるような運動モードを与える．$\boldsymbol{k}$ が同じでも異なる (i, j) 対に対応する励起状態は異なるエネルギーを持っている．粒子間相互作用が加われば $a_j^\dagger b_i^\dagger|\tilde{0}\rangle$ は一般には定常状態にならない．いいかえれば，$a_j^\dagger b_i^\dagger$ は(9.4.16)の形の方程式を満たさない．しかし，粒子間相互作用を通じて，同じ $\boldsymbol{k}$ を持つ (i, j) 対の励起が結合して規準振動に相当する励起を作り出す可能性がある．この場合には，いくつかの (i, j) 対励起が適当な位相関係で同時に起こっているわけで，系は集団的な運動をすることになる．

系のハミルトニアンを§9.2から

$$H = \sum_{i,j} (T_{ij} + U_{ij}) c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ij,kl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k \tag{9.4.23}$$

と書く．1粒子状態 φ_i を $T+U$ の固有状態，すなわち

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi_i + U\varphi_i = \varepsilon_i \varphi_i$$

と取っておくと

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} V_{ij,kl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k \tag{9.4.24}$$

と書ける．系が並進運動に対して不変であるときは，状態を規定する量として運動量を選ぶことができる．簡単のためにスピンなどは考えないこととし，1粒子状態は単位体積で規格化された平面波で与えられるとしよう．状態を表す添字 i として運動量そのものをとることにする：

$$\varphi_p(\boldsymbol{x}) = e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar} \tag{9.4.25}$$

粒子間相互作用行列要素は

$$\begin{aligned} V_{p_1'p_2', p_1p_2} &= \int e^{i(\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}_1')\cdot\boldsymbol{x} + i(\boldsymbol{p}_2 - \boldsymbol{p}_2')\cdot\boldsymbol{x}'} v(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') d^3\boldsymbol{x} d^3\boldsymbol{x}' \\ &= (2\pi)^3 \delta(\boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2 - \boldsymbol{p}_1' - \boldsymbol{p}_2') \int e^{i\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{p}_1 - \boldsymbol{p}_1')} v(\boldsymbol{r}) d^3\boldsymbol{r} \end{aligned}$$

であるから，$v(\boldsymbol{x})$ の Fourier 成分を

$$v_q = \int e^{iq\cdot x} v(x)\, d^3x \tag{9.4.26}$$

と置き，$\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \boldsymbol{p}_1', \boldsymbol{p}_2'$ についての和を δ 関数を用いて書き直すと

$$H = \sum_p \varepsilon_p c_p{}^\dagger c_p + \frac{1}{2} \sum_{qpp'} v_q c_p{}^\dagger c_{p'}{}^\dagger c_{p'-q} c_{p+q} \tag{9.4.27}$$

である．$|\tilde{0}\rangle$ に準拠して $c, c^\dagger$ を $a, a^\dagger, b, b^\dagger$ で書き直すと，(9.4.27)の右辺の第1項は

$$\sum_{|p|>p_F} \varepsilon_p a_p{}^\dagger a_p + \sum_{|p|\leq p_F} \varepsilon_p b_p b_p{}^\dagger = \sum_{|p|>p_F} \varepsilon_p a_p{}^\dagger a_p - \sum_{|p|\leq p_F} \varepsilon_p b_p{}^\dagger b_p + \sum_{|p|\leq p_F} \varepsilon_p$$

となるが，この式の右辺の第3項は相互作用のない場合の $|\tilde{0}\rangle$ のエネルギーである．これをエネルギーの基準にとることにすれば上式は

$$H_0 = \sum_{|p|>p_F} \varepsilon_p a_p{}^\dagger a_p - \sum_{|p|\leq p_F} \varepsilon_p b_p{}^\dagger b_p \tag{9.4.28}$$

である．一方，粒子間相互作用は a, b で表すと，$a^\dagger a^\dagger aa, a^\dagger a^\dagger b^\dagger b^\dagger, a^\dagger a^\dagger b^\dagger a, \cdots\cdots$ といろいろの形のものが現れるが，この中から $a^\dagger b^\dagger$ の形の励起モードを結合させるものだけを取り上げることにする．ここでは運動量遷移が $\boldsymbol{k}$ であるような対を考えているので，$a_{p+k}{}^\dagger b_p{}^\dagger$ (運動量 $\boldsymbol{k}$ の発生) と $b_p a_{p+k}$ (運動量 $\boldsymbol{k}$ の消滅) とが結合する形のものをとる．(9.4.27)でこれに対応するものは

$$H_{\rm I} = \frac{1}{2} \sum_{kpp'} v_{-k} (a_{p+k}{}^\dagger b_p{}^\dagger + b_{p+k} a_p)(a_{-p'-k}{}^\dagger b_{-p'}{}^\dagger + b_{-p'-k} a_{-p'}) \tag{9.4.29}$$

である．これ以外の項は今考えている運動モードに対しては高次の補正を与えると考える．この近似の妥当性を議論するのはこの節の目的ではないので，以下では系のハミルトニアンが $H=H_0+H_{\rm I}$ で与えられるとして話を進める†．運動量移行 $\boldsymbol{k}$ を作り出す演算子 $a_{p+k}{}^\dagger b_p{}^\dagger$ の運動方程式を作ると

$$[H, a_{p+k}{}^\dagger b_p{}^\dagger] \cong (\varepsilon_{p+k} - \varepsilon_p) a_{p+k}{}^\dagger b_p{}^\dagger + \frac{1}{2}(v_k + v_{-k}) \left\{ \sum_q (a_{q+k}{}^\dagger b_q{}^\dagger + b_{-q} a_{-q-k}) \right\}$$

となる．右辺にはこの他に $a, b, a^\dagger, b^\dagger$ を4個含む項が現れるがそれを落としてある．それは，$|\tilde{0}\rangle$ に演算子として0になるような項を落とすことに対応する．基底状態 $|\tilde{0}\rangle$ に対して励起状態を作り出す演算子を求めているので，(9.4.16)の式

---

† 近似の妥当性は系の状態や粒子密度，相互作用の性質などに依存し，具体的な例に応じて検討しなければならない．たとえば沢田克郎：『多体問題』，岩波書店(1961)，あるいは本講座第7巻『物性II』を参照されたい．

$[H, A^\dagger]=EA^\dagger$ が厳密に成立することを要請するのではなく，$[H, A^\dagger]|\tilde{0}\rangle=EA^\dagger|\tilde{0}\rangle$ が成立することを要請していると言ってよい．この条件が成立すれば $A^\dagger|\tilde{0}\rangle$ は H の固有状態である．さらに上式の右辺には v_{p-q} を含む項も現れるが，これも v_k を含む項に比べて小さいとして落としている．これは，ある特定の $\boldsymbol{k}$ に対して位相が揃った励起をまず取り上げることに相当し，乱雑位相近似とも呼ばれている．これらの落とした項は高次補正を与えると考える．

上式の右辺に現れる $b_{-p}a_{-p-k}$(同じく運動量移行 $\boldsymbol{k}$ を与える)に対して同様に運動方程式を作ると

$$[H, b_{-p}a_{-p-k}] \cong -(\varepsilon_{-p-k}-\varepsilon_{-p})b_{-p}a_{-p-k} -\frac{1}{2}(v_k+v_{-k})\left[\sum_q (a_{q+k}{}^\dagger b_q{}^\dagger+b_{-q}a_{-q-k})\right]$$

である．一般に $v(\boldsymbol{x})$ は $|\boldsymbol{x}|$ だけの関数である場合が多いので，$v_k=v_{-k}\equiv v(k)$ と書き，近似の意味の $\cong$ を等号で書くと，

$$[H, a_{p+k}{}^\dagger b_p{}^\dagger] = (\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p)a_{p+k}{}^\dagger b_p{}^\dagger+v(k)\sum_q (a_{q+k}{}^\dagger b_q{}^\dagger+b_{-q}a_{-q-k}) \tag{9.4.30a}$$

$$[H, b_{-p}a_{-p-k}] = -(\varepsilon_{-p-k}-\varepsilon_{-p})b_{-p}a_{-p-k}-v(k)\sum_q (a_{q+k}{}^\dagger b_q{}^\dagger+b_{-q}a_{-q-k}) \tag{9.4.30b}$$

という連立方程式が得られる．

この式は振動子の結合のときに現れた式と良く似ている．すなわち，$a_{p+k}{}^\dagger b_p{}^\dagger$ という運動モードと，同じ運動量移行 $\boldsymbol{k}$ を与える $a_{q+k}{}^\dagger b_q{}^\dagger$ および $b_{-q}a_{-q-k}$ との結合を与える式である．ここで，規準振動を生成する演算子として

$$A_\alpha{}^\dagger(\boldsymbol{k}) = \sum_p (X_\alpha{}^p(\boldsymbol{k})a_{p+k}{}^\dagger b_p{}^\dagger+Y_\alpha{}^p(\boldsymbol{k})b_{-p}a_{-p-k}) \tag{9.4.31}$$

と定義してみる．$[H, A_\alpha{}^\dagger(\boldsymbol{k})]=E_\alpha A_\alpha{}^\dagger(\boldsymbol{k})$ の式は

$$\sum_p [(E_\alpha-(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p))X_\alpha{}^p(\boldsymbol{k})a_{p+k}{}^\dagger b_p{}^\dagger+(E_\alpha+(\varepsilon_{-p-k}-\varepsilon_{-p}))Y_\alpha{}^p(\boldsymbol{k})b_{-p}a_{-p-k}]$$
$$=v(k)\left[\sum_{p,q}(X_\alpha{}^q(\boldsymbol{k})-Y_\alpha{}^q(\boldsymbol{k}))a_{p+k}{}^\dagger b_p{}^\dagger+\sum_{p,q}(X_\alpha{}^q(\boldsymbol{k})-Y_\alpha{}^q(\boldsymbol{k}))b_{-p}a_{-p-k}\right]$$

となる．両辺の $a_{p+k}{}^\dagger b_p{}^\dagger$, $b_{-p}a_{-p-k}$ の係数を等しいとおくと

$$[E_\alpha-(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p)]X_\alpha{}^p(\boldsymbol{k}) = v(k)\sum_q (X_\alpha{}^q(\boldsymbol{k})-Y_\alpha{}^q(\boldsymbol{k})) \tag{9.4.32a}$$

$$[E_\alpha+(\varepsilon_{-p-k}-\varepsilon_{-p})]Y_\alpha{}^p(\boldsymbol{k}) = v(k)\sum_q (X_\alpha{}^q(\boldsymbol{k})-Y_\alpha{}^q(\boldsymbol{k})) \tag{9.4.32b}$$

これから ($X\equiv Y\equiv 0$ ではないとして),

$$1=v(k)\sum_{p}\left[\frac{1}{E_\alpha-(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p)}-\frac{1}{E_\alpha+(\varepsilon_{-p-k}-\varepsilon_{-p})}\right],\qquad(9.4.33)$$

あるいは, $\varepsilon_{-p}=\varepsilon_p$ であるのが普通であるから

$$1=2v(k)\sum_{p}\frac{\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p}{E_\alpha{}^2-(\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p)^2}\qquad(9.4.34)$$

という分散式が得られる. これから, 規準振動のエネルギー E_α を求めることができる. (9.4.34)の右辺の $\sum$ は, $|\boldsymbol{p}|\leqq p_{\mathrm{F}}$, $|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{k}|>p_{\mathrm{F}}$ となるような $\boldsymbol{p}$ についての和である.

粒子数が多い場合には ε_p は連続に近いスペクトルとなる. したがって, $\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p$ も連続に近いスペクトルを示す. $v(k)<0$ であれば, 図9.2からわかるように分散式(9.4.34)の根 E_α はほとんどもとの $\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p$ に近いところに現れ, もとのスペクトルに埋もれてしまう. これに対し $v(k)>0$ の場合には $\varepsilon_{p+k}-\varepsilon_p$ の最大値から上に外れたところに1つの根が現れる. これはプラズマ振動などに見られるものである.

$a^\dagger b^\dagger$ あるいは $c^\dagger c$ は§9.3a) で見たように密度行列(演算子)である. すなわち, $a^\dagger b^\dagger$ で与えられる運動は密度のゆらぎである. これをもっと直截的に示すため, 密度行列の運動方程式を用いて上記の運動を記述してみよう. 密度行列 $\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ の運動方程式は(9.3.26)で与えられた. もし, ρ を作る時の状態 $|\Psi\rangle$ が単一の Slater 行列式で与えられるようなものであれば(9.3.26)の右辺に現れる2粒子密度行列 $\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_2;\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}_2)$ は(9.3.15)により1粒子密度行列によって定められる. したがって(9.3.26)は

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')}{\partial t}=&\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla^2-\nabla'^2)+U(\boldsymbol{x})-U(\boldsymbol{x}')\right\}\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\\&+\int\{V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_2)-V(\boldsymbol{x}',\boldsymbol{x}_2)\}\{\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\rho(\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_2)\\&-\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}_2)\rho(\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}')\}d^3\boldsymbol{x}_2\end{aligned}\qquad(9.4.35)$$

となる. これは, 行列の形式で

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}=[T+U+U',\rho]\qquad(9.4.36)$$

とも書ける. T は運動エネルギー演算子であり, U' は Hartree 方程式に出てく

る場で，行列要素で書けば

$$U_{ij}=\sum_{l,k}(V_{ik,jl}-V_{ik,lj})\rho_{lk} \tag{9.4.37}$$

である．もし，Hartree 場が取られていれば ρ は対角形であり，(9.4.35)の右辺は Hartree の方程式を用いて 0 になる．すなわち，Hartree の解が定常な状態を与えている．密度のゆらぎを見るのであるから，この解から少しずれた状態を考える．ただし，系の状態はやはり単一の Slater 行列で与えられる，すなわち，$\rho^2=\rho$ という条件はついているとする．定常解からのずれが小さいとして，これについて 1 次の項までとる．そうすると，定常解で占められている粒子準位と空いている準位との間の行列要素だけを考えればよいことになる．これは $a^\dagger b^\dagger, ab$ の型のものだけを取ることに対応している．この行列要素 $\rho_{\beta\alpha}$(α が占められた状態，β は空いている状態) を $A_{\beta\alpha}(t)$ とすると

$$\rho_{\beta\alpha}=A_{\beta\alpha},\qquad \rho_{\alpha\beta}=A_{\beta\alpha}{}^* \tag{9.4.38}$$

である．(9.4.35) あるいは (9.4.36) から

$$i\hbar\frac{dA_{\beta\alpha}(t)}{dt}=(\varepsilon_\beta-\varepsilon_\alpha)A_{\beta\alpha}(t)+\sum_{\alpha'}\sum_{\beta'}[(V_{\beta\alpha',\alpha\beta'}-V_{\beta\alpha',\beta'\alpha})A_{\beta'\alpha'}+(V_{\beta\beta',\alpha\alpha'}-V_{\beta\beta',\alpha'\alpha})A_{\beta'\alpha'}{}^*] \tag{9.4.39}$$

となる．ここで

$$A_{\beta\alpha}(t)=AX_{\beta\alpha}e^{-i\omega t}+A^*Y_{\beta\alpha}{}^*e^{i\omega t} \tag{9.4.40}$$

という形において解を求める．この表式を $A_{\beta\alpha}$ の運動方程式に入れて，X, Y に対し

$$\left.\begin{aligned}(\varepsilon_\beta-\varepsilon_\alpha)X_{\beta\alpha}+\sum_{\alpha'}\sum_{\beta'}[(V_{\beta\alpha',\alpha\beta'}-V_{\beta\alpha',\beta'\alpha})X_{\beta'\alpha'}&\\+(V_{\beta\beta',\alpha\alpha'}-V_{\beta\beta',\alpha'\alpha})Y_{\beta'\alpha'}]&=\hbar\omega X_{\beta\alpha},\\(\varepsilon_\beta-\varepsilon_\alpha)Y_{\beta\alpha}+\sum_{\alpha'}\sum_{\beta'}[(V_{\alpha\alpha',\beta\beta'}-V_{\alpha\alpha',\beta'\beta})X_{\beta'\alpha'}&\\+(V_{\alpha\beta',\beta\alpha'}-V_{\alpha\beta',\alpha'\beta})Y_{\beta'\alpha'}]&=-\hbar\omega Y_{\beta\alpha}\end{aligned}\right\} \tag{9.4.41}$$

という式が得られる．これが (9.4.32) に相当する式である．

第10章　場の量子論

場の量子論は，微視的世界の本質をよく把えた理論体系として，今日広範な分野に適用され威力を発揮している．相対論的場の量子論は，この理論にまつわる困難と限界を内包しながらも，現在素粒子の世界を記述する上で大きな理論的拠り所を与えている．また最近の非摂動論的方法の発展と相まって，原子核，物性論における多体系の新しい質の解明にも大きな役割を演じている．

この章では，はじめに場の量子論への導入をかねて，それが量子論一般の枠組の中でどのような位置にあるか，とくに前章まで述べてきた狭い意味での量子力学とどのような関係にたつかについて述べる．つづいておもに素粒子への適用を意識して，場の量子論の概要を入門的に述べる．しかしここでの議論はいわゆる局所場の理論に限定されている．現在素粒子と称されているものの背後には，より基本的な構成要素の存在する気配が濃厚であるが，その本性は未だ明らかでない．ここに述べる限定された場の量子論が，そのような基本要素の記述において，最終的にどのような関わりをもちうるかは未知数であるが，そこに到達する過程において場の量子論の諸概念が重要な役割をもつことは疑いえない．この両面の認識が，場の量子論の学習にあたって現在特に必要に思われる．

§10.1　de Broglie 波，量子化された波動場，および古典場について

ここでいままで述べてきた量子力学のすじみちを改めて振りかえって見よう．まず注目されることは，これまでに**2種類の量子力学的な波動**の概念が導入されていることである．その一つは，言うまでもなく，量子力学の発端に現れた de Broglie の物質波である．それはすでに第1章で導入され，第2章においてそれの従う Schrödinger の波動方程式が定式化された．もう一つは前章で導入された**第2量子化**された，演算子の性格をもつ波動場(*9. 2. 32*)がそれである．後者は

多体系の量子力学的記述においてごく自然に導入され，その定式化においてきわめて有効に働いている．

そこでまず，この‘第2量子化’された場の本性は何かという疑問が生まれてくる．de Broglieの物質波については，光の量子仮説とともに，それがわれわれの光や電子に対する古典的描像を真っ向から衝きくずすものであっただけに，量子力学の建設に際しての最大の関心事として，論争の焦点となったことはすでに述べた通りである．そこで到達した正統的解釈，つまり重ね合せ原理の上にたてられた確率解釈の下で，de Broglie波は確率振幅という意味をもつことになった．それに対して，一方の‘第2量子化’された場の方は，見方によっては，多粒子系の記述に際しての単なる道具立てとも考えられる．しかし以下で次第に明らかになるように，この‘第2量子化’された場の概念の導入によってはじめて，量子論の出発点となった物質の二重性の意味が真に解明されることになる．つまりこの場の量子論にいたってはじめて，物質一般の量子論は閉じた理論体系になるということができる．

a) 一般化された確率振幅とde Broglie波

粒子性と波動性を背負った新しい量子力学的対象が，de Broglieの波動関数によって適切に記述されるということは，一見，二重性の中で波動性に重きがあるかのような印象を与える．しかし量子力学の理論体系の展開を見ると，波動性の本質は量子力学的状態の重ね合せ原理の中にあることがわかる．事実この重ね合せ原理を忘れて単に状態が波動関数で記述されるということだけであるならば，波動関数の絶対値の2乗は3次元空間内における古典的粒子の存在確率分布あるいは3次元的に拡がった古典的連続体の密度分布を与えるという，量子力学建設の初期に現れた解釈も許されることになる．しかしすでに述べたように，量子力学的状態は最終的には，Hilbert空間のベクトルによって記述されることになり，重ね合せの原理はこの空間の基本的性質である線形性によって裏づけられることになる．そしてde Broglieの波動関数は，このベクトルに対する等価な幾つかの表現の中の1つである位置表示，つまり対象の位置測定に結びついた確率振幅として理解されることになった．したがって対象がN個の多粒子系である場合には，上の考えのごく自然な拡張として，de Broglie波は前章で述べた$3N$次元配位空間で定義された抽象的な確率振幅$\psi_N(x_1, x_2, \cdots, x_N, t)$に一般化される性

格のものであった．その意味で後者を今後**一般化された Schrödinger 関数**と呼ぶことがある．さらにまたこの節 c)項で述べるように，相対論的量子論においては，位置表示も一般には適用不可能ということになってくると，de Broglie 波を光と同様にわれわれの現実の時空間内の波動と解釈することはますます無理になる．

それでは量子力学においては，われわれの3次元空間あるいは相対論的にいって4次元時空間内での物質の運動という概念は消滅してしまっているのであろうか．このような疑問は，量子力学の成立後も長い間くすぶり，しばしば論争をよんだ．つまりそれは物質の存在と時間・空間といった哲学的問題にもつながる性格のものである．量子論の出現によって，機械的な決定論がくつがえされたが，さらにわれわれの時空間での因果律，運動すらも消滅したとする考えがおこり得たわけである．以下で述べるように，上述の‘第2量子化’された波動場の概念，それに基づく場の量子論は，このような疑問に対して明快な解答を与えることになる．すなわちこの波動場は，先の一般化された確率振幅としての de Broglie 波とは違って，われわれの時空間内の波動場である．そして今日量子電磁気学の成功に見られるように，少なくとも光と電子の系に関しては，このように‘第2量子化’された電子の場と電磁場の概念によってわれわれの時空間内での相互作用の生起がきわめて直感的に記述され，かつこのような描像の正しさは実験的にも高い精度で検証されている．

b) 運動の時空間記述と第2量子化された場の役割

ここで具体的に，第9章の**第2量子化された場**の導入の過程とその役割を振りかえってみる．そこではまず N 粒子系の記述にあたって，占有数表示が重要な役割をしている．以後は Bose 粒子系を例にとって話をすすめることにする．いま1粒子系の規格化直交系列を $\{\varphi_\alpha(\boldsymbol{x})\}$ とすると，$\alpha=1$ 状態に n_1 個，$\alpha=2$ 状態に n_2 個，…の粒子の占有している状態は，

$$|n_1, n_2, \cdots\rangle_N \qquad \left(\sum_i n_i = N\right) \tag{10.1.1}$$

と記述される．ここでつぎの性質をもつ生成・消滅演算子 $c_i^\dagger, c_i$:

$$\left.\begin{aligned} c_i|n_1, n_2, \cdots\rangle &= \sqrt{n_i}\,|n_1, \cdots, n_i-1, \cdots\rangle \\ c_i^\dagger|n_1, n_2, \cdots\rangle &= \sqrt{n_i+1}\,|n_1, \cdots, n_i+1, \cdots\rangle \end{aligned}\right\} \tag{10.1.2}$$

およびそれを用いた第2量子化された場の演算子

$$\left.\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x}) &= \sum_i c_i\varphi_i(\boldsymbol{x}) \\ \psi^\dagger(\boldsymbol{x}) &= \sum_i c_i{}^\dagger\varphi_i(\boldsymbol{x})\end{aligned}\right\} \tag{10. 1. 3}$$

が，それぞれ導入された．ここでわれわれは，この第2量子化された場の演算子が，実は位置表示での粒子の生成・消滅演算子という意味をもつことを確かめることができる．それを見るために，この場の演算子の性質を規定している交換関係 (*9. 2. 33*)

$$\left.\begin{aligned}&[\psi(\boldsymbol{x}),\psi^\dagger(\boldsymbol{x}')] = \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \\ &[\psi(\boldsymbol{x}),\psi(\boldsymbol{x}')] = [\psi^\dagger(\boldsymbol{x}),\psi^\dagger(\boldsymbol{x}')] = 0\end{aligned}\right\} \tag{10. 1. 4}$$

を用いて，やはり§9. 2 c) で導入された N 粒子系の状態

$$|\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}}\psi^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\psi^\dagger(\boldsymbol{x}_2)\cdots\psi^\dagger(\boldsymbol{x}_N)|0\rangle \tag{10. 1. 5}$$

の内積を調べてみる．

$$\begin{aligned}&\langle\boldsymbol{x}_1{}',\boldsymbol{x}_2{}',\cdots,\boldsymbol{x}_N{}'|\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N\rangle \\ &\quad= \frac{1}{N!}\sum_P \delta(\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_{i_1}{}')\delta(\boldsymbol{x}_2-\boldsymbol{x}_{i_2}{}')\cdots\delta(\boldsymbol{x}_N-\boldsymbol{x}_{i_N}{}').\end{aligned} \tag{10. 1. 6}$$

この式は，$|\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N\rangle$ が3次元空間内におかれた N 個の粒子がそれぞれ確定した位置 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N$ にある状態を記述していることをうかがわせる．このことをより正確にいうには，$|\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N\rangle$ の変数 $\boldsymbol{x}_i$ が，実際に位置座標の意味をもつことを確かめる必要がある．そこでわれわれの系の全運動量演算子 $\boldsymbol{P}$ が，いまの生成・消滅演算子を用いて

$$\boldsymbol{P} = \int d^3x\,\psi^\dagger(\boldsymbol{x})\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}}\psi(\boldsymbol{x}) \tag{10. 1. 7}$$

と与えられることに注意して(§10. 3 c)項参照)，よく知られた変位 $\boldsymbol{a}$ の**推進演算子**

$$D(\boldsymbol{a}) = e^{-i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{P}/\hbar} \tag{10. 1. 8}$$

を導入しよう．このとき，$D(\boldsymbol{a})$ は

$$\left.\begin{aligned}D(\boldsymbol{a})\psi(\boldsymbol{x})D^{-1}(\boldsymbol{a}) &= \psi(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a}) \\ D(\boldsymbol{a})\psi^\dagger(\boldsymbol{x})D^{-1}(\boldsymbol{a}) &= \psi^\dagger(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{a})\end{aligned}\right\} \tag{10. 1. 9}$$

を満たす．したがってまた

$$D(\boldsymbol{a})|\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N\rangle = |\boldsymbol{x}_1+\boldsymbol{a}, \boldsymbol{x}_2+\boldsymbol{a}, \cdots, \boldsymbol{x}_N+\boldsymbol{a}\rangle \qquad (10.1.10)$$

の性質を満足することが(*10.1.4*)の交換関係を用いて容易に確かめられる．上の関係式は，変数 $\boldsymbol{x}$ が，実際に3次元空間の位置座標を示す量であること，したがってまた $|\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N\rangle$ が上に述べた物理的意味をもつ状態であることを示す．さらに(*10.1.5*)に立ち返ってみると，第2量子化された場の演算子 $\psi(\boldsymbol{x})$, $\psi^\dagger(\boldsymbol{x})$ が空間位置 $\boldsymbol{x}$ に**局在化**した粒子を消滅・生成する演算子であるという結論に到達する．

さてこのような性質をもつ場の演算子が導入された意義は何であろうか．すでに第9章に示したように，実際この量子化された場によって，いま考えている多粒子系のハミルトニアンがきわめて簡潔に記述され，特にその相互作用の時空間的振舞いが明瞭に表現されることがわかる．つまり2体相互作用を通じて作用し合っている N 粒子系でのハミルトニアン

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left(\frac{\boldsymbol{p}_i^{\,2}}{2m}+U(\boldsymbol{x}_i)\right)+\frac{1}{2}\sum_{i,j} V(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) \qquad (9.1.3)$$

は，場の演算子を用いると

$$H = \int d^3x\psi^\dagger(\boldsymbol{x})\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\boldsymbol{x})\right\}\psi(\boldsymbol{x})$$
$$+\frac{1}{2}\int d^3xd^3x'\psi^\dagger(\boldsymbol{x})\psi^\dagger(\boldsymbol{x}')\,V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}) \qquad (9.2.51)$$

のように記述される．状態ベクトルへの H の働き方は，もちろん(*10.1.4*)の交換関係によって規定されている．

(*9.2.51*)の H の第2項は，いうまでもなくこの系の相互作用の**素過程**(elementary process)を記述している．この相互作用は，古典力学的に見れば，3次元空間内の $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'$ に位置する2粒子間の遠隔作用である．量子力学的に見ると，この遠隔作用は(*9.2.51*)の Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle \qquad (9.2.52)$$

に従って，系の状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ の時間的変化をひきおこす．しかしその変化の過程は，古典的粒子の場合の連続的な軌道の変化とは異なって，上述の $\psi(\boldsymbol{x})$, $\psi^\dagger(\boldsymbol{x})$ の性質に応じて $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'$ の各点に局所化された2つの量子力学的粒子が消滅し，新たにその各点に2つの粒子が生成される過程として記述される．こ

のように，われわれの4次元時空間内での運動の概念は否定されたわけではなく，第2量子化された場の概念の導入によって，量子力学的系の時間的変化は，3次元空間内における量子力学的粒子の絶え間ない消滅・生成の過程として把えられることになる．これは古典的物質粒子の連続的運動の概念に対して，新しい量子力学的変化の概念を持ちこむことを意味している．

このような描像を可能にする量子化された場の概念も，(*9. 2. 51*)のHのように，系の**粒子数**Nや**粒子の種類**が保存している場合には，多粒子系の記述の単なる簡便な道具といえるかも知れない．しかしそれが本質的となるのは，われわれが今日よく知っている光の放出・吸収や電子・陽電子の対消滅・対生成などのように，系の粒子数が変化する場合や，原子核のβ崩壊の過程のように，粒子の種類の変化をもたらす相互作用の記述においてである．原子核のβ崩壊のメカニズムは，前世紀から大きな謎とされてきたが，多くの実験的，理論的研究の積み重ねののち，1934年Fermiによって解明され，さらに湯川理論(1935)に発展することになる(本講座第10巻『素粒子論』参照)．それによって，この現象は原子核の構成要素である中性子と陽子が**相互変脱**し，同時に電子と中性微子が放出される過程として説明されることになった．それは

$$中性子(\mathrm{n}) \longrightarrow 陽子(\mathrm{p})+電子(\mathrm{e})+中性微子(\nu) \qquad (10.1.11)$$

のように表される(図10.1)．ところでFermiがこのメカニズムを量子力学的に正しく定式化するにあたっては，まさに量子化された場の理論によらねばならなかったのである．歴史的には場の量子論は，量子力学の建設にひきつづき，1927年から1928年にかけてのDirac, Jordan, Klein, Weisskopf, Wignerらの一連の研究ののち，1929年のHeisenbergとPauliの仕事を頂点にしてほぼ完成された．それは相対性理論をも考慮した理論体系であり，今日の相対論的場の量子論の原型をなすものであるが，Fermiはいち早くこれをβ崩壊の現象の解明に適用したわけである．すなわち，(*10. 1. 11*)の相互作用は，中性子，陽子，電子，中性微子を記述する第2量子化された場$\psi_{\mathrm{n}}(\boldsymbol{x})$, $\psi_{\mathrm{p}}(\boldsymbol{x})$, $\psi_{\mathrm{e}}(\boldsymbol{x})$, $\psi_{\nu}(\boldsymbol{x})$を用いて，(*9. 2. 51*)の$H$の相互作用項と類似した形

$$G\int d^3\boldsymbol{x}\psi_{\mathrm{p}}^{\dagger}(\boldsymbol{x})\psi_{\mathrm{n}}(\boldsymbol{x})\psi_{\mathrm{e}}^{\dagger}(\boldsymbol{x})\psi_{\nu}(\boldsymbol{x}) \qquad (10.1.12)$$

によって記述される(相対論的かつ厳密な定式化については，本講座第10巻『素

粒子論』参照)．こうして(*10. 1. 11*)の β 崩壊は，原子核内の中性子が**消滅**し，かわってそこに陽子，電子，中性微子が新たに**生成**される過程として説明されることになった．

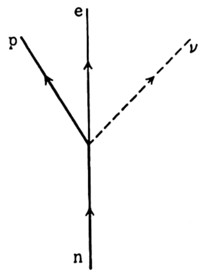


図 10.1　β 崩壊

以上の β 崩壊の現象に見られる粒子の種類の相互転化，生成・消滅の現象は，今日，素粒子の世界ではきわめて普遍的現象であることが知られている．そのような**素粒子の相互転化**の法則の記述において，特に相互作用のもつ局所性，因果律，相対論的不変性など時空的振舞いの記述において，量子化された場が本質的な役割を演じている．またこれまでは，量子化された場が，一般的な量子力学系のハミルトニアンの記述において果たす役割について述べたが，後に見るように，系のすべての**オブザーバブル**がこの量子化された場の演算子によって表現されることになるのである．

c)　一般化された Schrödinger 関数と第 2 量子化された場

つぎに第 2 量子化された場と，N 粒子系の確率振幅との関係を見よう．両者の関係は(*9. 2. 47*)によって与えられている．

$$\psi_N(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N, t) = \langle \boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N | \Psi(t)\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\psi(\boldsymbol{x}_1)\psi(\boldsymbol{x}_2)\cdots\psi(\boldsymbol{x}_N)|\Psi(t)\rangle. \quad (9.\ 2.\ 47')$$

$N=1$ の確率振幅は，いうまでもなく，量子力学の出発点となった de Broglie の波動であるが，それは

$$\psi_{N=1}(\boldsymbol{x}, t) = \langle \boldsymbol{x}|\Psi(t)\rangle = \langle 0|\psi(\boldsymbol{x})|\Psi(t)\rangle \qquad (10.\ 1.\ 13)$$

となる．これまでわれわれは $\psi(\boldsymbol{x})$ を第 2 量子化された場と呼んできたが，それを文字通りに解釈して，“古典的粒子に対する‘第 1 量子化’の結果としての de Broglie 波 $\psi_{N=1}(\boldsymbol{x}, t)$ を‘第 2 (再度) 量子化’した結果として，$\psi(\boldsymbol{x})$ に到達する”と解するのは，必ずしも正しくない．まず両者の波動方程式の構造を見てもその違いは明白である．そもそも $\psi(\boldsymbol{x})$ は，時間依存のない演算子として導入されているが，しかしそれは描像 (Schrödinger 描像) に起因するものであって，時間微分に対応する演算子 $\dot{\psi}(\boldsymbol{x})$ は容易に導入される．

$$\dot{\psi}(\boldsymbol{x}) \equiv \frac{i}{\hbar}[H, \psi(\boldsymbol{x})]. \qquad (10.1.14)$$

上の H に(9.2.51)を代入すると，(9.2.33)の交換関係を用いて，次の波動方程式が導かれる．

$$-\frac{\hbar}{i}\dot{\psi}(\boldsymbol{x}) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\boldsymbol{x})\right\}\psi(\boldsymbol{x}) + \int d^3x'\psi^\dagger(\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}). \qquad (10.1.15)$$

一方 de Broglie 波の満たす波動方程式は，

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_{N=1}(\boldsymbol{x}, t) &= \langle 0|\psi(\boldsymbol{x})H|\Psi(t)\rangle \\ &= \langle 0|\dot{\psi}(\boldsymbol{x})|\Psi(t)\rangle \end{aligned}$$

に(10.1.15)を用いて

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_{N=1}(\boldsymbol{x}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\boldsymbol{x})\right)\psi_{N=1}(\boldsymbol{x}, t) \qquad (10.1.16)$$

として得られる．(10.1.15)の右辺の第2項が寄与しないのは，$\langle 0|\psi^\dagger(\boldsymbol{x})=0$ のためであるが，物理的にはここで考えている系のハミルトニアン(9.2.51)が粒子数を保存している結果である．一般の $\psi_N(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N, t)$ については，

$$\begin{aligned} &-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_N(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N, t) \\ &= -\frac{\hbar}{i}\sum_{k=1}^{N}\langle 0|\psi(\boldsymbol{x}_1)\psi(\boldsymbol{x}_2)\cdots\dot{\psi}(\boldsymbol{x}_k)\cdots\psi(\boldsymbol{x}_N)|\Psi(t)\rangle \\ &= \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{N}U(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}\sum_{i,j}V(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j)\right\}\psi_N(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N, t) \end{aligned} \qquad (10.1.17)$$

すなわち第9章の(9.2.53)に到達する．

ここで，次の点に注意しなければならない．$N=1$ の de Broglie 波 $\psi_{N=1}(\boldsymbol{x}, t)$ の満たす Schrödinger 方程式(10.1.16)は，第2量子化された場の波動方程式(10.1.15)とよく似ているが，前者が波動関数 $\psi_{N=1}$ について**線形**であるのに対して，後者は一般に**非線形**項を含む点で本質的に違っている．後者の非線形項は，粒子間の相互作用を表す．しかし，この相互作用は，Schrödinger 方程式(10.1.17)においては，$\psi_N(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N, t)$ の非線形性をもたらすことはない．後の節

で扱うような一般に粒子数を非保存とする場合においても，それの線形性は常に維持されており，高々 $\{\psi_N,\ N=0, 1, 2, \cdots\}$ についての連立方程式が現れるだけである．いうまでもなく，この確率振幅についての線形性は，*(9. 2. 52)* の Schrödinger 方程式の $|\Psi(t)\rangle$ についての線形性に起因している．

以上で，第2量子化された場と，配位空間で定義された N 粒子系の確率振幅——一般化された Schrödinger 関数——の間の関係が明らかになったが，ここで後者についてさらに若干述べる必要がある．結論的にいえば，第2量子化された場(以後，量子化された場と呼ぶ)は量子力学の体系の中で本質的であるが，上述の配位空間に導入された N 粒子系の確率振幅は，状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ に対する1つの表示であり，かつ相対論的理論においては一般に確率振幅の意味をもちえなくなるという点である．実際，上述の例に沿って考えると，量子力学的系の運動を決定するには，*(9. 2. 52)* の Schrödinger 方程式の中のハミルトニアン H がわかればよい．かつこの H は量子化された場の量 $\psi(\boldsymbol{x})$ で構成されており，後者の演算子としての性質は交換関係 *(9. 2. 33)* によって定まっている．Schrödinger 方程式を具体的に解くには，適当な表示——つまり適当な直交基底ベクトル系列を導入するのが一般である．いま問題となっている配位空間での一般化された Schrödinger 関数を与える *(10. 1. 5)* の基底ベクトル系列もその1つである．ところで系に相対論的不変性が要請されるときは，H の構造も規制されるのと同時に，量子化された場の波動方程式 *(10. 1. 15)* および交換関係 *(10. 1. 4)* も相対論的共変性を満足するよう修正される(§10.4 参照)．その結果，Bose 粒子系においては *(10. 1. 5)* の基底ベクトル系列はもはや *(10. 1. 6)* の直交性を満たさなくなる．したがって，$\{\psi_N,\ N=0, 1, 2, \cdots\}$ も確率解釈にとって不可欠である規格化条件

$$1=\sum_{N=0}^{\infty}\int d^3\boldsymbol{x}_1\cdots d^3\boldsymbol{x}_N|\psi_N(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N, t)|^2 \qquad (10.\,1.\,18)$$

を一般に満たさなくなる．こうして波動関数 $\psi_N(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N, t)$ なるものはたとえ定義されたとしても，もはや確率振幅の意味をもちえない．一方量子化された場 $\psi(\boldsymbol{x}), \psi^\dagger(\boldsymbol{x})$ も $\boldsymbol{x}$ に局在化した粒子の消滅・生成の演算子という性格を正確に保持することはできなくなる．またそれの従う波動方程式には，相対論的共変性の要請から，時間•空間について2階の微分方程式，いわゆる Klein-Gordon

型(§10.4参照)の形式が現れてくる．このことはSchrödinger方程式が確率解釈の原理に則って，時間について1階微分方程式であることが厳格に要請されたのと，対照的である．

以上のように相対論的理論では，'位置表示'での基底ベクトル系列(*10.1.5*)は適切でなくなり，それにかわって運動量表示がひろく用いられる．それは(*9.2.22*)あるいは(*9.2.26*)を基底ベクトル系列とする占有数表示で，状態指定iは運動量のほか，スピン状態などを意味する．このときは相対論的理論においても，(*9.2.19*)，(*9.2.25*)の形の交換関係が維持され，基底ベクトル系列の直交性が保証されるので，この表示での振幅は確率振幅の意味をもつことができる．

d) コヒーレント状態と古典的波動

以上のように，状態規定において位置表示よりも占有数表示がより適切であるということになると，量子論では，波動性よりも粒子性の方がより本質的であるように見えてくる．しかし実際にわれわれの3次元空間内に'波動現象'が登場するのは，以下で見るように生成・消滅演算子がもつ位相概念を通じてである．それが実際の古典的波動の位相に対応するものであることは，**量子化された場**を通じて明白になる．

話を再び**Bose粒子系**に限定する．われわれはさきに(*9.2.21*)で**数演算子**

$$N_i = c_i^\dagger c_i \qquad (10.1.19)$$

を導入した．ここでさらに**位相演算子**ϕ_iを導入して，$c_i, c_i^\dagger$をつぎのように書くことができる．

$$c_i = e^{i\phi_i}\sqrt{N_i}, \qquad c_i^\dagger = \sqrt{N_i}e^{-i\phi_i}. \qquad (10.1.20)$$

$c_i, c_i^\dagger$は相互にHermite共役の関係にあるのに対して，N_i, ϕ_iはともにHermite演算子である．$c_i, c_i^\dagger$の満たす交換関係

$$[c_i, c_k^\dagger] = \delta_{ik} \qquad (10.1.21)$$

に，上の(*10.1.20*)を代入すると，

$$e^{i\phi_i}N_i - N_i e^{i\phi_i} = e^{i\phi_i}. \qquad (10.1.22)$$

N_iとϕ_iの物理的意味は，量子化された場$\psi(\boldsymbol{x})$(*10.1.3*)を見るとはっきりする．

$$\psi(\boldsymbol{x}) = \sum_i e^{i\phi_i}\sqrt{N_i}\cdot\varphi_i(\boldsymbol{x}). \qquad (10.1.23)$$

すなわち(*10.1.22*)のϕ_iとN_iの非可換性を無視して古典論に移れば，ϕ_iは古典的波動$\psi(\boldsymbol{x})$の部分波の位相に，またN_iはその強度に対応する量で，かつ両者

は相互に正準共役変数であることがわかる(本節 e)参照).

さて(*10. 1. 22*)の交換関係は，もし ϕ_i と N_i が，よく知られた正準交換関係

$$[\phi_i, N_i] = -i \qquad (10.1.24)$$

を満たすならば，成立することは容易に確かめられる．実際，(*10. 1. 24*)から $[\phi_i^n, N_i] = -in\phi_i^{n-1}$ が導かれること，および $e^{i\phi_i} = \sum_{n=0}^{\infty}(i\phi_i)^n/n!$ に注意すればよい．しかし Jordan (1927) によってかつて指摘されたように，正準変数である N_i が，0, 1, 2, … のような離散的な固有値をとるときは，その正準共役量 ϕ_i との間に(*10. 1. 24*)の正準交換関係を要請することは正しくなく，(*10. 1. 22*)の形にとどまらなければならないことが知られている．この点については次の e) 項で詳しくふれる．

さて話をもとに戻して，(*10. 1. 22*)の交換関係を見ると，N と ϕ は相補的関係にあり，したがって N の固有状態は波動像を犠牲にしていることがわかる．

コヒーレント表示　そこで個数性と位相の双方を部分的に犠牲にすることによって，消滅演算子 $c = e^{i\phi}\sqrt{N}$ 自身の固有状態をつくることはできないだろうか．もしそれが可能ならば，(*10. 1. 23*)から，それは量子化された場 $\psi(x)$ そのものの固有状態を意味するから，まさにわれわれの時空間内の古典的波動を再現することになる．そのような表示は実際に存在し，**コヒーレント表示**と呼ばれている．当面特定の $c_i, c_i^\dagger$ について議論を進めるので，その添字 i を省略する．いま求める c の固有値を α，その固有状態を $|\alpha\rangle$ と書くと，

$$c|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \qquad (10.1.25)$$

一方 N の固有状態 $|n\rangle$ は，(*9. 2. 22*)に従って

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(c^\dagger)^n|0\rangle \qquad (10.1.26)$$

で与えられるが，これと(*10. 1. 25*)の両辺の状態との内積をとることによって，つぎの等式を得る．

$$(n+1)^{1/2}\langle n+1|\alpha\rangle = \alpha\langle n|\alpha\rangle. \qquad (10.1.27)$$

ここで(*9. 2. 13*)の性質を用いた．(*10. 1. 27*)は求める $|\alpha\rangle$ の，占有数表示での振幅 $\langle n|\alpha\rangle$ に対する漸化式である．それは容易に解くことができて

$$\langle n|\alpha\rangle = A\alpha^n/(n!)^{1/2}. \qquad (10.1.28)$$

ここで $A \equiv \langle 0|\alpha\rangle$ は，$|\alpha\rangle$ の規格化によってきめられる．こうして規格化された

$|\alpha\rangle$ は，つぎのように与えられる．

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{(n!)^{1/2}}|n\rangle$$
$$= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\exp(\alpha c^\dagger)|0\rangle. \qquad (10.1.29)$$

固有値 α としては任意の複素数が許され，コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ の下での粒子数 N の期待値は

$$\langle N\rangle = |\alpha|^2 \qquad (10.1.30)$$

によって与えられる．

ここで2つのことに注意する必要がある．まず $|\alpha\rangle$ は(10.1.25)によって c の固有状態であるが $c^\dagger$ の固有状態ではなく，ただ(10.1.25)と共役な関係式

$$\langle\alpha|c^\dagger = \langle\alpha|\alpha^* \qquad (10.1.25')$$

を満たす点である．また c と $c^\dagger$ はそれ自身は Hermite 演算子ではないから，上述のように固有値として複素数が許される．しかしここでは一般に相異なる固有値 α, β に対応する固有状態 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ は直交せず，その内積はつぎのようになることが確かめられる．

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \exp\left\{\alpha^*\beta - \frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2\right\}. \qquad (10.1.31)$$

その際，つぎのような**完全性**(詳しくは over-completeness)が成り立つことも確かめられる．

$$\frac{1}{\pi}\int d^2\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha| \equiv \frac{1}{\pi}\int rdrd\varphi|re^{i\varphi}\rangle\langle re^{i\varphi}| = 1. \qquad (10.1.32)$$

ただし $\alpha\equiv re^{i\varphi}$.

以上では特定の状態について考察したが，一般のコヒーレント状態は，上の結果の直積をとることによって容易につくれる．いま $|\alpha_1, \alpha_2, \cdots\rangle\equiv|\alpha_1\rangle|\alpha_2\rangle\cdots$ と記述すれば，それは量子化された場 $\psi(\boldsymbol{x})$ の固有状態となる．実際，

$$\psi(\boldsymbol{x})|\alpha_1, \alpha_2, \cdots\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} c_i|\alpha_1, \alpha_2, \cdots\rangle\varphi_i(\boldsymbol{x})$$
$$= \left(\sum_{i=1}^{\infty}\alpha_i\varphi_i(\boldsymbol{x})\right)|\alpha_1, \alpha_2, \cdots\rangle. \qquad (10.1.33)$$

同様にして

$$\langle \alpha_1, \alpha_2, \cdots | \psi^\dagger(\boldsymbol{x}) = \langle \alpha_1, \alpha_2, \cdots | \left(\sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i{}^* \varphi_i{}^*(\boldsymbol{x}) \right). \qquad (10.1.34)$$

すなわちコヒーレント状態の下では，量子化された場の量 $\psi(\boldsymbol{x})$ は，古典的な c 数波動

$$\varphi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x}) \equiv \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i \varphi_i(\boldsymbol{x}) \qquad (10.1.35)$$

と同様に振舞う.

さて古典的に波動として知られてきた現実の光についていえば，最近かなりよい近似でコヒーレント状態によって記述されるものが実現されるようになった．その代表的なものとしてレーザー光などがある．しかし自然光は，純粋のコヒーレント状態ではなく，むしろそれの混合状態 $\sum_{\alpha} w(\alpha)|\alpha\rangle\langle\alpha|$ として理解されるべきである．また一般に上述のコヒーレント状態が時間的に安定した持続性をもちうるかどうかも重要な問題で多くの研究がなされている．それは $\psi(\boldsymbol{x})$ の従う波動方程式によるわけで，たとえば(10.1.15)で挙げられた例のように $\dot{\psi}$ を規定する波動方程式が ψ の他に $\psi^\dagger$ を含むと，後者はコヒーレンスを乱す役割をする.

いうまでもなく，これまでくりかえし述べたように，コヒーレント状態において‘古典的波動’として現れてくるものは de Broglie 波ではなく，場の演算子 $\psi(\boldsymbol{x})$，つまり光の場合についていえば電場，磁場の演算子 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})$ が，特殊な量子多体系状態において示す c 数的振舞いにほかならない．ところが光については相対性理論を考慮に入れることが本質的に重要になる．実際，$\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}$ はよく知られた相対論的に共変な Maxwell の波動方程式に従う．かつ $\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{H}$ はオブザーバブルであるため，Hermite 演算子でなければならない．このためにそれらを生成・消滅演算子で表すと，これまで述べた ψ に対する(10.1.3)の表現とは違って，これら生成・消滅演算子の 1 次結合となることが要請される．くわしい議論は，§10.4 にゆずるが，いま運動量表示で生成・消滅演算子を $\boldsymbol{a}^\dagger(\boldsymbol{k}, \lambda)$, $\boldsymbol{a}(\boldsymbol{k}, \lambda)$ ($\boldsymbol{k}$ は運動量，λ は光子のスピン状態を記述する)とすると，それはつぎのように表される(本講座第 10 巻『素粒子論』§3.1 参照).

$$\boldsymbol{E} = \dot{\boldsymbol{A}} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} A_0, \qquad \boldsymbol{H} = \nabla \times \boldsymbol{A} \qquad (10.1.36)$$

として，このベクトル・ポテンシャル $A_\mu(\boldsymbol{x})$ は

$$A_\mu(\boldsymbol{x}) \equiv (\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}),\ A_0(\boldsymbol{x}))$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_{\lambda=1}^{4} \int d^3\boldsymbol{k} \sqrt{\frac{c}{2\omega}} e_\mu(\boldsymbol{k}, \lambda)[a(\boldsymbol{k}, \lambda)e^{ikx} + a^\dagger(\boldsymbol{k}, \lambda)e^{-ikx}]. \tag{10.1.37}$$

ただしここで

$$\omega \equiv \sqrt{\boldsymbol{k}^2} \tag{10.1.38}$$

$$[a_\mu(\boldsymbol{k}, \lambda),\ a_\nu{}^\dagger(\boldsymbol{k}', \lambda)] = \hbar c \delta_{\lambda\lambda'} \delta^3(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'). \tag{10.1.39}$$

また $e_\mu(\boldsymbol{k}, \lambda)$ は光の偏りを表す4元ベクトルで

$$e_\mu(\boldsymbol{k}, \lambda) e_\mu(\boldsymbol{k}, \lambda') = \delta_{\lambda\lambda'} \tag{10.1.40}$$

を満たす．このように量子化された場が生成・消滅演算子の1次結合によって表現されることは，電磁場に限らず，相対論的場については一般的である．このため，われわれがさきに導入したコヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ $(\equiv|\alpha_1, \alpha_2, \cdots\rangle)$ は，もはや $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}$ の固有状態とはなりえない．そこで $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x})$ と $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})$ を，それぞれ生成演算子と消滅演算子を含む部分(自由場の場合の正，負振動数部分に対応)に分解して，それを $\boldsymbol{E}^{(\pm)}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{H}^{(\pm)}(\boldsymbol{x})$ と記述すると，はじめて

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{E}^{(-)}(\boldsymbol{x})|\alpha\rangle &= \boldsymbol{E}_{\mathrm{cl.}}{}^{(-)}(\boldsymbol{x})|\alpha\rangle \\ \langle\alpha|\boldsymbol{E}^{(+)}(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{E}_{\mathrm{cl.}}{}^{(+)}(\boldsymbol{x})\langle\alpha| \end{aligned}\right\} \tag{10.1.41}$$

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{H}^{(-)}(\boldsymbol{x})|\alpha\rangle &= \boldsymbol{H}_{\mathrm{cl.}}{}^{(-)}(\boldsymbol{x})|\alpha\rangle \\ \langle\alpha|\boldsymbol{H}^{(+)}(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{H}_{\mathrm{cl.}}{}^{(+)}(\boldsymbol{x})\langle\alpha| \end{aligned}\right\} \tag{10.1.42}$$

となる．ただし $\boldsymbol{E}_{\mathrm{cl.}}{}^{(\pm)}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{H}_{\mathrm{cl.}}{}^{(\pm)}(\boldsymbol{x})$ は，$\boldsymbol{E}^{(\pm)}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{H}^{(\pm)}(\boldsymbol{x})$ において，

$$\left.\begin{aligned} a(\boldsymbol{k}, \lambda) &\longrightarrow \alpha(\boldsymbol{k}, \lambda) \\ a^\dagger(\boldsymbol{k}, \lambda) &\longrightarrow \alpha^*(\boldsymbol{k}, \lambda) \end{aligned}\right\} \tag{10.1.43}$$

のおきかえをして得られるc数波動関数である．$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})$ から構成される古典的に知られる物理量 $f(\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H})$ に対しては，量子論ではそれに正規積(normal-product, §10.4参照)の操作をほどこしたオブザーバブル $:f(\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}):$ が対応する．後者においては f の中の $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}$ を $\boldsymbol{E}^{(\pm)}, \boldsymbol{H}^{(\pm)}$ に分解しすべての生成演算子 $\boldsymbol{E}^{(+)}, \boldsymbol{H}^{(+)}$ が，すべての消滅演算子 $\boldsymbol{E}^{(-)}, \boldsymbol{H}^{(-)}$ の左側に位置するよう積の順序が定められているので，

$$\langle\alpha| :f(\boldsymbol{E}, \boldsymbol{H}): |\alpha\rangle = f(\boldsymbol{E}_{\mathrm{cl.}}, \boldsymbol{H}_{\mathrm{cl.}}) \tag{10.1.44}$$

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{E}_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x}) &\equiv \boldsymbol{E}_{\mathrm{cl.}}{}^{(+)}(\boldsymbol{x})+\boldsymbol{E}_{\mathrm{cl.}}{}^{(-)}(\boldsymbol{x}) \\ \boldsymbol{H}_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{H}_{\mathrm{cl.}}{}^{(+)}(\boldsymbol{x})+\boldsymbol{H}_{\mathrm{cl.}}{}^{(-)}(\boldsymbol{x}) \end{aligned}\right\} \qquad (10.1.45)$$

が成立する．

現在われわれは多種多様な素粒子の存在を知っているが，古典的波動は光についてのみ経験されてきた事実はどのように説明されるべきであろうか．これを裏がえせば物質一般のコヒーレント状態はいかにして可能かという問題である．(*10.1.29*)の定義からわかるように，コヒーレント状態は粒子数の不確定な状態，具体的には無数の粒子が供給可能な状況が必要とされる．光の場合は，光子の質量が零であることと，それをたやすく生成しうる源としての電子が，自然界の物質の構成要素として無尽蔵に存在していることが本質的要因として挙げられよう．一方光子に次いでの軽い Bose 粒子は π 中間子であるが，その質量は電子の約 270 倍に達する．しかし π 中間子は，それの生成の源である核子とは，電磁的相互作用に比して遙かに強い相互作用をもち，各種の共鳴状態をつくることが知られている(本講座第 10 巻『素粒子論』§1.3, §6.7 参照)．これらの事実を考慮にいれると，現在理論的な見通しとして，もし 10^{-13}cm 立方中に 1 個程度の高い核子密度をもつ‘核物質’があれば，その中では π 中間子のコヒーレント状態(π 中間子**凝縮**とも呼ばれる)，つまり π 中間子の古典波が実現されるものとして期待される．たとえば**中性子星**などがそのような対象として注目されている．

Fermi 粒子の場合　以上の議論はすべて Bose 粒子の場合について進められてきた．Fermi 粒子についても同様に古典的波動の出現を期待できるか興味ある問題である．この場合，Bose 粒子との明白な違いは Pauli 原理のはたらきである．その生成・消滅演算子は，(*9.2.25*)の交換関係をみたす．

$$\left.\begin{aligned} c_i c_j{}^\dagger + c_j{}^\dagger c_i &= \delta_{ij} \\ c_i c_j + c_j c_i &= c_i{}^\dagger c_j{}^\dagger + c_j{}^\dagger c_i{}^\dagger = 0 \end{aligned}\right\}. \qquad (10.1.46)$$

ここでまた特定の i 状態に注目し，c_i を単に c と記述する．(*10.1.20*)にならってここでも数演算子 N と位相演算子 ϕ を導入すると，(*10.1.46*)より

$$\left.\begin{aligned} e^{i\phi}N+Ne^{i\phi} &= e^{i\phi} \\ e^{i\phi}\sqrt{N}e^{i\phi}\sqrt{N} &= 0 \end{aligned}\right\} \qquad (10.1.47)$$

が導かれる．上の交換関係から，われわれはすでに N の固有値は，0 と 1 に限られることを知っている．一方 Bose 粒子系に導入されたコヒーレント状態の概念

は，同一状態に無数の粒子が同時に存在しうることを前提にしているわけで，そのままの形をFermi粒子の場合にもちこむことはできない．ただ消滅演算子の固有状態ではないが，

$$|\alpha\rangle=(1-|\alpha|^2)^{1/2}|0\rangle+\alpha|1\rangle \qquad (|\alpha|^2<1) \tag{10.1.48}$$

なる状態を考えると，それは(*10. 1. 30*), (*10. 1. 32*)に類似した性質

$$\langle\alpha|N|\alpha\rangle=|\alpha|^2 \tag{10.1.30'}$$

$$\frac{1}{\pi}\int_{|\alpha|^2<1} dadb|\alpha\rangle\langle\alpha|=1 \qquad (\alpha\equiv a+ib) \tag{10.1.32'}$$

を満足することが知られている．

以上のことから，Fermi粒子については，それ自身の古典場の出現を期待することはできないことがわかった．ところでわれわれは偶数個のFermi粒子からなる複合系は，Bose粒子的に振舞うことを知っている．実際，中性子と陽子はいずれもFermi粒子であるが，それらから構成される原子核は質量数の偶奇性によって，それぞれBose統計，Fermi統計に従う．したがってFermi粒子を記述する量子化された場$\psi_{\mathrm{F}}(x)$それ自身は古典的波動として出現することはなくても，それの偶数個の積から作られる複合Bose粒子の場が巨視的波動性を示すような状態の存在が期待される．その際，複合Bose粒子の場を構成する消滅演算子$c_i^{(\mathrm{B})}$は，Fermi粒子の$c_i^{(\mathrm{F})}$から，たとえば

$$c_i^{(\mathrm{B})}=\sum_{j,k}f_{jk}{}^i c_j{}^{(\mathrm{F})}c_k{}^{(\mathrm{F})} \tag{10.1.49}$$

のように作られ，**近似的**に(*10. 1. 21*)の交換関係を満たす．$c_i^{(\mathrm{B})}$が近似的に作るコヒーレント状態をFermi粒子のレベルから見れば，Pauli原理と抵触することなしに，(*10. 1. 49*)の対の形で，無数個の相異なる状態のFermi粒子がつくり出されていることがわかる．実際の例として，合成系のスピンが零でBose統計に従う^{4}Heの原子は極低温において第2種相転移を起こし，超流動性を示すことがよく知られているが，これは上述のメカニズムによるものとして説明される．また電子はFermi統計に従うが，金属内における**電子対**(Cooperペアと呼ばれる)が低温でコヒーレント状態をつくる多数の超伝導金属の存在も知られている(本講座第7巻『物性II』，§4.6参照)．

上述のように，コヒーレント表示は，量子論と古典論，あるいは**微視的**世界の法則と**巨視的**現象を結ぶ上で重要な役割をしているが，この点をいち早く指摘し

たのは Schrödinger である．1926 年，一連の波動力学の論文が完成される過程でなされたもので，その“ミクロの力学からマクロの力学への連続的移行”(Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik) と題する論文において，Schrödinger は 1 次元調和振動子の波動力学をとりあげ，新しい力学の意味を考察している．1 次元調和振動子の系は，1 組の生成・消滅演算子で記述される (§3.5 参照) ことはよく知られているが，Schrödinger はそこで上述のコヒーレント状態に対応する波動関数を導入し，Gauss 型関数状に凝縮した波束が時間的に持続し，その中心が古典力学の描像に合致した正弦振動を行うことを示した．Schrödinger はこの例によって，de Broglie 波で記述される微視的世界においても，行列力学の学派のいう神秘的現象——たとえば電子の位置概念の消滅——が起きていることはなく，巨視的・古典的世界の現象と連続的なつながりを持つことを主張した．しかしその後 Heisenberg によって指摘されたように，この波束の**凝縮の持続性**は調和振動子模型に特有なものであって，他の一般系では成り立たないことが明らかになる．かつ de Broglie 波自体を拡がった対象の密度分布に関係づける Schrödinger の古典的解釈は，やがてコペンハーゲン解釈に止揚されることになる．実際，これまでに述べたように巨視的・古典的世界に直接つながる波動は，粒子数の確定した状態に対応する de Broglie 波あるいは一般化された Schrödinger 関数において実現するのではなく，むしろ粒子数が本質的に不確定となるコヒーレント状態あるいはそれによって近似されるような状態での**量子化された場の演算子**の振舞いにおいて見られるものである．そのような問題はあるとしても，上述のコヒーレント状態をミクロとマクロの結接点として把えた Schrödinger の考察は，先駆的な意義をもつものと言えよう．

最後に古典的あるいは巨視的場として触れる必要のあるのは**重力場**である．これが弱い静的な場としてだけでなく，文字通り波動場として実在しうるか，また本性上これまでに述べた輻射場などと同じく，微視的世界の対応する量子——graviton と呼ばれる——をもつものか，あるいは時空そのものと関係した異質な存在なのかは現在のところ確認されていない(本講座第 11 巻『宇宙物理学』§7.11 参照)．

e) 多粒子系の量子力学と場の正準量子化

これまでの議論で，粒子の生成・消滅を伴うような本格的な量子論においては，

量子化された場の概念が本質的に重要になることがわかった．しかしそこではこの量子化された場の基本的性格を決める波動方程式の形や交換関係を設定する原理には触れられずに，むしろそれらは多粒子系の量子力学から**発見法的**に求められたものであった．場の正準量子化の一般的形式は，1929 年 Heisenberg と Pauli によって完成されたが，それに先立ち古くから輻射場として知られてきた光の放出・吸収の量子論は，1927 年 Dirac によってはじめて定式化された．そこではこれまでに述べた生成・消滅演算子に対応する量が導入され，それらが輻射場の系の正準共役変数を構成していることを明らかにした上で，質点系の正準量子化の考えに沿って，それらの間に交換関係が設定された．この考えを物質波にも適用し，光と物質波の統一的記述を目ざしたのが，同じく 1927 年の Jordan と Klein の仕事である．しかし，輻射場と違って，物質粒子の波動として何を考えるかには大いに問題のあることは，すでに述べた通りである．歴史的には，当然のことながら，紆余曲折をたどっている．Jordan と Klein の仕事でも，“電気的相互作用の下での de Broglie 波の量子化”として，量子化された場の波動方程式 (*10. 1. 15*) と同型の式を，c 数の de Broglie 波 $\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)$ の波動方程式としてとりあげている．この場合は $\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)$ について非線形の項の中のポテンシャルは，Coulomb ポテンシャルである．

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+U(\boldsymbol{x})\right\}\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)$$
$$+\int d^3x'\psi_{\mathrm{cl.}}{}^*(\boldsymbol{x}',t)\,V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\,\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x}',t)\,\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t). \tag{10.1.50}$$

上式を量子化の対象とすることは，結果的には正しいわけであるが，その際 $\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)$ は量子力学的な確率振幅の意味をもちえないことは，これまでにくわしく述べた通りである．ここでつぎの非摂動解

$$\varepsilon_i\varphi_i(\boldsymbol{x})=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right\}\varphi_i(\boldsymbol{x}) \tag{10.1.51}$$

の構成する規格化直交系列 $\{\varphi_i(\boldsymbol{x})\}$ を用いて，(*10. 1. 50*) の解を展開する．

$$\left.\begin{aligned}\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x},t)&=\sum_i c_i(t)\varphi_i(\boldsymbol{x})\\ \psi_{\mathrm{cl.}}{}^*(\boldsymbol{x},t)&=\sum_i c_i{}^*(t)\varphi_i{}^*(\boldsymbol{x})\end{aligned}\right\} \tag{10.1.52}$$

$$c_i(t)=\int d^3\boldsymbol{x}\psi_{\text{cl.}}(\boldsymbol{x},t)\varphi_i{}^*(\boldsymbol{x}) \tag{10.1.53}$$

$$c_i{}^*(t)=\int d^3\boldsymbol{x}\psi_{\text{cl.}}{}^*(\boldsymbol{x},t)\varphi_i(\boldsymbol{x}). \tag{10.1.54}$$

こうすると，波動関数の時間的振舞いは，$\{c_i(t)\}$ のそれによって完全にきまる．後者の運動方程式を Hamilton 形式にもちこむために，まず(*10.1.50*)を Euler 方程式として与える作用量を求める(くわしくは§10.2, a)参照)．

$$\delta A=\delta\int dt\int d^3\boldsymbol{x}L(x)=0 \tag{10.1.55}$$

$$\begin{aligned}L(x)=&\frac{-\hbar^2}{2m}(\nabla\psi_{\text{cl.}}{}^*)\cdot(\nabla\psi_{\text{cl.}})-\frac{\hbar}{2i}\left(\psi_{\text{cl.}}{}^*\frac{\partial}{\partial t}\psi_{\text{cl.}}-\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi_{\text{cl.}}\right)^*\psi_{\text{cl.}}\right)\\&-\int d^3\boldsymbol{x}\psi_{\text{cl.}}{}^*(\boldsymbol{x},t)\,U(\boldsymbol{x})\,\psi_{\text{cl.}}(\boldsymbol{x},t)\\&-\frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{x}'\psi_{\text{cl.}}{}^*(\boldsymbol{x},t)\psi_{\text{cl.}}{}^*(\boldsymbol{x}',t)\,V(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')\,\psi_{\text{cl.}}(\boldsymbol{x}',t)\psi_{\text{cl.}}(\boldsymbol{x},t).\end{aligned} \tag{10.1.56}$$

これに(*10.1.52*)を代入すると，

$$\begin{aligned}\bar{L}\equiv\int d^3\boldsymbol{x}L=&-\sum_i\epsilon_ic_i{}^*(t)c_i(t)-\frac{\hbar}{2i}\sum_i\left(c_i{}^*(t)\frac{\partial}{\partial t}c_i(t)-\left(\frac{\partial}{\partial t}c_i{}^*(t)\right)c_i(t)\right)\\&-\sum_{i,j}v_{ij}{}^{(1)}c_i{}^*(t)c_j(t)-\frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l}v_{ij,kl}{}^{(2)}c_i{}^*(t)c_j{}^*(t)c_k(t)c_l(t).\end{aligned} \tag{10.1.57}$$

ここに，$v^{(1)},v^{(2)}$ は(*9.2.5*)，(*9.2.29*)で与えられる係数である．いま $\{c_i(t),c_i{}^*(t)\}$，$(i=1,2,\cdots)$ を一般化座標として，(*10.1.57*)からそれの正準共役変数 $\pi_i(t),\pi_i{}^*(t)$ を求めようとすると，

$$\left.\begin{aligned}\pi_i(t)&=\partial\bar{L}/\partial\dot{c}_i(t)=-\frac{\hbar}{2i}c_i{}^*(t)\\\pi_i{}^*(t)&=\partial\bar{L}/\partial\dot{c}_i{}^*(t)=\frac{\hbar}{2i}c_i(t)\end{aligned}\right\} \tag{10.1.58}$$

となって，$\{\pi_i,\pi_i{}^*\}$ と $\{c_i,c_i{}^*\}$ は独立でないことがわかる．このような事情は，時間について 1 階の微分方程式の場合に，しばしば生ずる(§10.4, c)参照)．このまま正準形式を遂行しようと思えば，第 11 章で述べる拘束条件のあるときの

量子化の一般論を適用する必要がある．しかし，いまの場合は，この拘束条件は簡単な技術的工夫によって避けることができる．すなわち，(10.1.57)の $\bar{L}$ に $-(\hbar/2i)(\partial/\partial t)\sum_i c_i^*(t)c_i(t)$ という項を付加しても，それから導かれる Euler 方程式は不変であるから，それを新たな $\bar{L}$ として採用する．すると後者では第2項が単に $-(\hbar/i)\sum_i c_i^*(t)(\partial/\partial t)c_i(t)$ におきかえられ，$(\partial/\partial t)c_i^*$ を含む項がなくなる．こうして一般化座標を $\{c_i(t)\}$ $(i=1, 2, \cdots)$ とすると，それに正準共役な一般化運動量は

$$\pi_i(t) = -\frac{\hbar}{i}c_i^*(t) \tag{10.1.59}$$

となる．系のハミルトニアンは

$$\begin{aligned}\bar{H} &= \frac{-\hbar}{i}\sum_i c_i^*(t)\frac{\partial}{\partial t}c_i(t) - \int d^3x L \\ &= \sum_i \varepsilon_i c_i^*(t)c_i(t) + \sum_{i,j} v_{ij}{}^{(1)}c_i^*(t)c_j(t) \\ &\quad + \frac{1}{2}\sum_{i,j,k,l} v_{ij,kl}{}^{(2)}c_i^*(t)c_j^*(t)c_k(t)c_l(t).\end{aligned} \tag{10.1.60}$$

したがって求める正準運動方程式は

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}c_i &= \frac{1}{i\hbar}\frac{\partial\bar{H}}{\partial c_i^*} \\ \frac{\partial}{\partial t}c_i^* &= -\frac{1}{i\hbar}\frac{\partial\bar{H}}{\partial c_i}\end{aligned}\right\}. \tag{10.1.61}$$

いうまでもなく，$c_i(t), c_i^*(t)$ はこれまで考察してきた生成・消滅演算子に対応する古典的量であり，上の結果は $\{c_i(t)\}$ と $\{i\hbar c_i^*(t)\}$ が正準共役変数の組をなすことを示している．

ここでついでに占有数および位相に対応する量についての正準運動方程式を与えておく．(10.1.20)にならって

$$\left.\begin{aligned}c_i(t) &= \sqrt{N_i(t)}\,e^{i\phi_i(t)} \\ c_i^*(t) &= \sqrt{N_i(t)}\,e^{-i\phi_i(t)}\end{aligned}\right\}. \tag{10.1.62}$$

ここに $N_i(t), \phi_i(t)$ は，実の c 数である．(10.1.62)を(10.1.57)の $\bar{L}$ に代入すると，時間微分を含む第2項は

$$-\frac{\hbar}{2i}\sum_i\left\{c_i^*\frac{\partial}{\partial t}c_i - \left(\frac{\partial}{\partial t}c_i^*\right)c_i\right\} = -\hbar\sum_i N_i(t)\frac{\partial}{\partial t}\phi_i \tag{10.1.63}$$

となる．したがって $\{\phi_i(t)\}$, $(i=1, 2, \cdots)$ を新たに系の一般化座標として採用すると，それに正準共役な一般化運動量 $\pi_i(t)$ は

$$\pi_i(t) = -\hbar N_i(t). \tag{10.1.64}$$

ハミルトニアンは，(10.1.60) を ϕ_i, N_i で書きかえた式に一致する．

$$\bar{H} = \sum_i \epsilon_i N_i(t) + \sum_{i,j} v_{ij}{}^{(1)} \sqrt{N_i(t)}\, e^{-i\phi_i(t)} \sqrt{N_j(t)}\, e^{i\phi_j(t)} + \cdots. \tag{10.1.65}$$

正準運動方程式は

$$\left.\begin{aligned} \hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi_i(t) &= \frac{-\partial\bar{H}}{\partial N_i(t)} \\ \hbar\frac{\partial}{\partial t}N_i(t) &= \frac{\partial\bar{H}}{\partial\phi_i(t)} \end{aligned}\right\}. \tag{10.1.66}$$

つぎに**量子化の問題**に移ろう．§9 でわれわれは多粒子系の量子力学から2種類の交換関係，すなわち Bose 粒子型 (9.2.19) および Fermi 粒子型 (9.2.25) を導いた．それらは結果的には今の正準変数の組 $\{c_i(t),\ \pi_i(t)=i\hbar c_i^*(t)\}$ に対してそれぞれ

$$\left.\begin{aligned} [c_i(t), \pi_j(t)] &= i\hbar\delta_{ij} \\ [c_i(t), c_j(t)] &= [\pi_i(t), \pi_j(t)] = 0 \end{aligned}\right\} \tag{10.1.67}$$

あるいは

$$\left.\begin{aligned} \{c_i(t), \pi_j(t)\} &= i\hbar\delta_{ij} \\ \{c_i(t), c_j(t)\} &= \{\pi_i(t), \pi_j(t)\} = 0 \end{aligned}\right\} \tag{10.1.68}$$

の交換関係を課すことによって達成される．Bose 粒子型の (10.1.67) は，よく知られた質点系の量子化に際しての対応原理からそのまま導かれるが，Fermi 型の (10.1.68) は，この原理からは説明がつかない．この点に関して，Jordan (1927) による興味深い考察がある．

正準変数と正準交換関係　この Jordan の議論は，古典論と量子論をつなぐ重要な内容をもち，以下の議論にも関係するので，ここで簡単にそれにふれておく．通常，古典論から量子論に移るには，前者において正準共役の組として知られる変数 $(q\,;p)\equiv(q_1, q_2, \cdots, q_f\,; p_1, p_2, \cdots, p_f)$ について，Poisson 括弧式を通じて，

$$[q_i, p_j](\equiv q_i p_j - p_j q_i) = \frac{i}{\hbar}[q_i, p_j]_{\text{Poiss.}} = \frac{i}{\hbar}\delta_{ij} \tag{10.1.69}$$

のいわゆる**正準交換関係**を設定する．しかしこれが正しいのは，p_i, q_i が連続固

有値をもつ場合であって，離散的固有値の場合には，一般に許されない．たとえば，$f=1$ の簡単な場合，p が $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \cdots$ の離散的固有値をもつとする．このとき $f(z)$ を $z=\alpha_i$, $(i=1, 2, 3, \cdots)$ で1次の零点をもつ超越整関数とすると

$$f(p)=0. \tag{10.1.70}$$

一方(*10. 1. 69*)からは

$$[q, f(p)] = -\frac{\hbar}{i}f'(p) \neq 0 \tag{10.1.71}$$

のように，(*10. 1. 70*)と矛盾した結果が導かれる．そこで Jordan は(*10. 1. 69*)の関係を，一般的要請としてはとりやめ，つぎのような考えを導入した．いま $q=(q_1, q_2, q_3, \cdots, q_f)$ と $p=(p_1, p_2, p_3, \cdots, p_f)$ を2組の完全観測量とする．

$$\left.\begin{aligned} q_i|q\,;q'(=q_1', q_2', \cdots, q_f')\rangle &= q_i'|q\,;q'(=q_1', q_2', \cdots, q_f')\rangle \\ p_i|p\,;p'(=p_1', p_2', \cdots, p_f')\rangle &= p_i'|p\,;p'(=p_1', p_2', \cdots, p_f')\rangle \end{aligned}\right\} \tag{10.1.72}$$

を満たす固有状態 $|q\,;q'\rangle$, $|p\,;p'\rangle$ は，それぞれつぎのような規格化直交系列をつくる．

$$\left.\begin{aligned} \langle q\,;q'|q\,;q''\rangle &= \prod_{i=1}^{f}\delta(q_i'-q_i'') \\ \langle p\,;p'|p\,;p''\rangle &= \prod_{i=1}^{f}\delta(p_i'-p_i'') \end{aligned}\right\}. \tag{10.1.73}$$

ただし右辺の δ 関数は，離散的固有値部分に対しては Kronecker の δ を，また連続的固有値部分に対しては Dirac の δ 関数を意味する．ここで q と p が量子力学的に正準共役であることの条件をつぎのように定式化する．

$$\langle q\,;q'|p\,;p'\rangle = \text{const.}\exp\left\{\left(i\sum_{i=1}^{f}p_i'q_i'\right)\Big/\hbar\right\}. \tag{10.1.74}$$

(*10. 1. 74*)は，(*10. 1. 72*), (*10. 1. 73*)とともに，q と p のマトリックスとしての関係をきめるのに十分であり，連続的固有値のときは，(*10. 1. 69*)の正準交換関係を与えることは容易に確かめられる．ところで一般に(*10. 1. 74*)の条件は，(*10. 1. 73*)を考慮すると次の関係を導く．

$$\left.\begin{aligned} \tilde{\sum_{\{p'\}}} e^{i\sum_{i=1}^{f}p_i'(q_i'-q_i'')} &= \text{const.}\prod_{i=1}^{f}\delta(q_i'-q_i'') \\ \tilde{\sum_{\{q'\}}} e^{-i\sum_{i=1}^{f}q_i'(p_i'-p_i'')} &= \text{const.}\prod_{i=1}^{f}\delta(p_i'-p_i'') \end{aligned}\right\}. \tag{10.1.75}$$

ただし $\tilde{\sum}$ は，離散的固有値部分に対しては通常の和記号を，連続的固有値部分に対しては積分記号を意味する．(*10.1.75*)の結果は，一般に $\{q_i\}$，$\{p_i\}$ の固有値スペクトルは独立ではありえないことを示す．たとえば占有数 N と位相 ϕ（あるいは周期系の作用変数と角変数など）の場合，もし N が k をある整数値として

$$N = 0, 1, 2, \cdots, k-1 \tag{10.1.76}$$

の固有値をもつとすると，それに正準共役な変数 $\hbar\phi$ は

$$\hbar\phi = \frac{h}{k}(0, 1, 2, \cdots, k-1) \tag{10.1.77}$$

の離散的固有値のもとで(*10.1.75*)を満たすことがわかる．

前項 d）で議論した **Bose 粒子**の場合は，$k\to\infty$ とした極限であり，このとき ϕ は $0\leqq\phi\leqq 2\pi$ の連続固有値をもつが，(*10.1.24*)は成立せず，(*10.1.22*)が導かれることがわかる．

一方この Jordan の考えが Fermi 粒子にも適用可能とすれば，それは $k=2$ の場合に対応し，(*10.1.77*)によって ϕ は

$$\phi = (0, \pi) \tag{10.1.78}$$

の離散的固有値をもつことになる．(*10.1.74*)の仮定にそって，占有数表示で N, ϕ, $e^{i\phi}$ の行列要素を計算すると，Pauli のスピン行列を用いて，つぎのようになる．

$$N = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = (1+\tau_3)/2 \tag{10.1.79}$$

$$\left.\begin{aligned} \phi &= \frac{\pi}{2}\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \frac{\pi}{2}(1-\tau_1)/2 \\ e^{i\phi} &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \tau_1 \end{aligned}\right\}. \tag{10.1.80}$$

このマトリックス表現は，正しく(*10.1.47*)の交換関係を再現している．しかし(*10.1.69*)の形のいわゆる正準交換関係は，$[\phi, N]_\pm$ のいずれに対しても成り立たない．

以上の結果から，Jordan の**一般化された正準量子化の仮定**は，少なくとも Bose 統計と Fermi 統計の可能性を統一的に説明する 1 つの興味ある仮説であると言える．しかしこの考えをさらに押しすすめると，k としてこれ以外の可能性，

すなわちBose型，Fermi型以外の統計性による場の量子化，およびそれに伴う新しい種類の粒子の存在の可能性が生まれる．一方これとは別の観点から，やはりBose型，Fermi型以外の統計性の可能性——いわゆる**パラ統計**の理論的可能性がGreenらによって指摘され，研究されている(§10.5参照)．

しかし以後の議論では主としてBose型，Fermi型に限って考察を進める．またこれまでの話では，与えられた場がいずれの統計に従うかをきめる原理を欠いている．しかしそれは次節の一般的考察から，系のエネルギーの正値性の要請や時間反転の下での系の不変性などの要請の下に，**スピンと統計**の関係として定まることが明らかになる．

§10.2 Lagrange形式による場の方程式とNoetherの定理

前節末尾のe)項で，われわれは(*10.1.50*)の波動方程式を例として，多粒子系の量子力学の枠組の中に導入された第2量子化と，場そのものに対する(一般化された意味での)正準量子化が同等の内容をもつことを明らかにした．したがって今後は，多粒子系の量子力学を媒介にせずに，むしろはじめから考えうる種々の場の方程式を設定し，それを正準量子化することによって，直接場の量子論に到達することを試みる．それによって，これまでの多粒子系に課せられてきた制約——例えば粒子数一定など——から解放された，一般的な量子力学的系の取扱いが可能になる．その際の‘考えうる種々の場の方程式’の設定とは，最終的には自然界に実在性をもつ場を発見してゆくことにほかならない．実際，場が対象とする範囲は物性論の分野も含めて広範にわたるが，以下では自然の基本的な物質構成としての素粒子に焦点をおいて議論を進める．それについても，われわれはすでに豊富な実験的事実や理論的思考にもとづく，確からしい場の方程式の設定の諸原理をもっている．物理法則のもつ変分原理的性格，理論の相対論的不変性，経験的に知られる種々の対称性や保存量の存在などが，場の量子論の構造をきめる上で基本的な役割をはたしている．

以下順を追って，前節e)項で述べた場の量子化のすじみちを一般的な形で定式化する．

a) Lagrange形式による場の方程式

いま考察の対象とする一連の場を$u_A(\boldsymbol{x}, t)$とする．添字Aは，たとえば(*10.*

1.37)の電磁ポテンシャル A_μ の4元ベクトル成分や(§7.4)の Dirac 場 $\psi_\alpha(x)$ の4成分を代表したり，核子の陽子，中性子を区別するアイソ・スピン成分などを表す．また $u_A(x)$ は，一般に複素関数であってもよいが，そのときは A として u_A と $u_A{}^*$ は独立にかぞえられる．

場の満たす波動方程式を**変分原理**から導くには，$u_A(\boldsymbol{x},t)$ を $r=(\boldsymbol{x},A)$ で区別される無限自由度の一般化座標 $q_r(t)$ と見なし，後者の $\delta q_r(t)\equiv q_r{}'(t)-q_r(t)$ の変分に対応して，つぎの場の変分を考える．

$$\delta u_A(\boldsymbol{x},t)=u_A{}'(\boldsymbol{x},t)-u_A(\boldsymbol{x},t). \tag{10.2.1}$$

このとき

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}\delta u_A(x)=\delta\frac{\partial}{\partial x_\mu}u_A(x) \tag{10.2.2}$$

が成り立つ．ただし今後相対論的記述の便宜上

$$\left.\begin{aligned} x_\mu &= (x_i, ix_0) \qquad (\mu=1,2,3,4\,;\ i=1,2,3) \\ x_0 &= ct \end{aligned}\right\} \tag{10.2.3}$$

の記号を用いる．また特にことわらない限り，$c=\hbar=1$ の**自然単位**を採用する．この単位系ではすべての物理量は，長さのディメンションの適当なベキに帰着させられる．x_μ についての微分，たとえば $(\partial/\partial x_\mu)u_A(x)$ に対しても，混乱のない限り，$\partial_\mu u_A(x)$ あるいは $u_{A,\mu}(x)$ と記すことがある．また $A_\mu B_\mu=A_1B_1+A_2B_2+A_3B_3+A_4B_4=A_iB_i-A_0B_0$ のように，1つの項の中でくりかえされるギリシャ文字(あるいはイタリック体文字)は，混乱のないかぎり和記号 $\sum_{\mu=1}^{4}$ $\left(\text{あるいは}\ \sum_{i=1}^{3}\right)$ を省略してあるものと理解されたい．

つぎに変分の対象となる Lagrange 関数 $\bar{L}(x_0)$ に対してつぎの重要な仮定をおく．すなわち $\bar{L}$ は

$$\bar{L}(x_0)=\int d^3\boldsymbol{x}L(\boldsymbol{x},x_0) \tag{10.2.4}$$

のように，Lagrange 密度関数 $L(x_\mu)$ の空間積分という構造をもち，$L(x_\mu)$ は4次元時空点 x_μ における $\{u_A(x)\}$ と $\{u_{A,\mu}(x)\}$ の**局所的関数** $L(u(x),u_{,\mu}(x))$ であるとする．ここには2つの仮定が含まれている．1つは $L(x)$ が $u_A(x)$ とそれの高々1階の時空間微分 $u_{A,\mu}(x)$ を含むとしている点で，したがってそれから導かれる波動方程式は，時空間について高々2階の微分方程式であることを前提にして

いる．もう1つは $L(x)$ の**局所性**である．$L(x)$ は当然場の相互作用項をも含むことになるが，この仮定によって相互作用の素過程は局所的にのみ生起すること，したがって例えば(*10.1.50*)に見られるような遠隔作用は許されず，それは場の媒介による近接作用によっておきかえられなければならない．

ところで上述の2つの仮定は，つぎの意味で相互に関連していることに注意すべきである．たとえばいま $L(x)$ が局所的でなく，

$$L_I(x) = g\int d^4x' u_1(x)u_2(x)F(x-x')u_3(x') \qquad (10.2.5)$$

のような，**非局所的相互作用**を含んでいるとしよう．ただし以後 $d^4x \equiv d^3\boldsymbol{x}dx_0$ の記号を用いる．**形状因子** $F(x-x')$ は，場の量とは無関係な，適当に与えられた関数とする．それを Fourier 展開を用いて，形式的に次のように書き下す．

$$\begin{aligned} F(x-x') &= \int d^4k\tilde{F}(k_\sigma)e^{ik_\mu\cdot(x_\mu-x_\mu')} \\ &= \tilde{F}\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_\sigma}\right)\int d^4k e^{ik_\mu(x_\mu-x_\mu')} \\ &= (2\pi)^4\tilde{F}\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_\sigma}\right)\delta^4(x-x'). \end{aligned} \qquad (10.2.6)$$

これを(*10.2.5*)に代入すると

$$L_I(x) = (2\pi)^4 g u_1(x)u_2(x)\tilde{F}\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_\sigma}\right)u_3(x). \qquad (10.2.7)$$

すなわち非局所的相互作用をあえて局所的な形に書きかえようとすると，今度は場に**無限階の時空間微分**を持ちこんだ相互作用が現れる．

いずれにせよ，$L(x)$ に対する上の仮定は理論の可能性の枠をせばめているわけであるが，しかしいったんこの枠をはずすと相対性理論や量子力学の諸原理に抵触する困難をひきおこし，これまでの多くの研究によっても積極的な打開の見通しが得られていない．§10.7では，局所理論のもたらす発散の困難の問題と関連して，高階時空間微分を含む場の理論にふれる．

話をもとに戻して，上述の $L(x)$ の下で，つぎのように作用積分の変分を遂行する．

$$\delta A=\delta\int_{x_0^{(1)}}^{x_0^{(2)}}dx_0\bar{L}(x_0)=\int_{x_0^{(1)}}^{x_0^{(2)}}d^4x\delta L(u(x),u_{,\mu}(x))$$
$$=\int_{x_0^{(1)}}^{x_0^{(2)}}d^4x\sum_A\left\{\frac{\partial L}{\partial u_A(x)}\delta u_A(x)+\frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}(x)}\delta u_{A,\mu}(x)\right\}$$
$$=\int_{x_0^{(1)}}^{x_0^{(2)}}d^4x\sum_A\left(\frac{\partial L}{\partial u_A}-\frac{\partial}{\partial x_\mu}\frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}}\right)\delta u_A+\int_{x_0^{(1)}}^{x_0^{(2)}}d^4x\frac{\partial}{\partial x_\mu}\left(\sum_A\frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}}\delta u_A\right). \tag{10.2.8}$$

ここで $\int_{x_0^{(1)}}^{x_0^{(2)}}d^4x\cdots$ の積分は時間については $x_0^{(1)}$ と $x_0^{(2)}$ の間に画され，空間的には無限遠にわたる4次元領域について遂行される．その際，場の量が空間的に無限遠においては零になることを仮定すると，(*10.2.8*)の第2項は

$$\int d^3x\sum_A\frac{\partial L}{\partial u_{A,0}}\delta u_A(x)\Bigg|_{x_0=x_0^{(1)}}^{x_0=x_0^{(2)}}$$

となるが，よく知られるように $\delta u_A|_{x_0=x_0^{(1)},x_0^{(2)}}=0$ とされるので，この項は零となる．したがって任意の変分の下で $\delta A=0$ を要請すると，求める Euler の運動方程式は

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}\frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}(x)}-\frac{\partial L}{\partial u_A(x)}=0 \tag{10.2.9}$$

となる．

さきに述べたように，場 $u_A(x)$ として複素関数を考えるときは，$u_A^*(x)$ も $u_A(x)$ と独立な変分の対象となる．そのとき(*10.2.9*)の Euler 方程式は u_A, u_A^* のそれぞれについて導かれるが，両者が矛盾しないためには，L は実数関数でなければならない．

b) Noether の定理——種々の不変性と保存量

われわれがいま場 $u_A(x)$ によって記述しようとしている対象は，固有の質量，スピン，アイソ・スピン，電荷などの属性をもっているのが一般である．それらの物理量は以下で見るように，系のもつ種々の変換の下での**不変性**(あるいは対称性)と，それに伴って導かれる種々の**保存量**に関係している場合が多い．不変性や保存量の中には，相対論的不変性や電荷の保存のように，厳密に成り立っていると考えられているものもあるが，アイソ・スピン空間での回転不変性のように近似的に成り立っているものがほとんどである．この項では系のもつ種々の不変性が，どのような保存量に結びつくか，はじめに L の具体的な形に依存しない

一般的な形で導き，つづいてよく知られた幾つかの例について述べることにする.

系のもつ不変性には，大きくわけて**連続変換**と**非連続変換**の下での不変性がある．後者は次節で述べる種々の反転，たとえば時間・空間反転や粒子-反粒子反転などである．それに対して前者は，この項で扱う，幾つかの連続パラメーターで特徴づけられる変換である．たとえば4次元空間内での並進や回転，スケール変換，ゲージ変換などである．この場合変換の性質をみるには，パラメーターの無限小変化に対応する**無限小変換**を考察すれば十分であることが知られている.

いま無限小変換が，s 個の独立な無限小パラメーター $\delta\omega_i$ $(i=1, 2, \cdots, s)$ でひきおこされているとする．まず座標変換

$$x_\mu \longrightarrow x_\mu' = x_\mu + \delta x_\mu \tag{10. 2. 10}$$

において，δx_μ は $\delta\omega_i$ の1次結合によって次のように記述される.

$$\delta x_\mu = \sum_{i=1}^{s} X_{\mu i}\delta\omega_i. \tag{10. 2. 11}$$

ここに $X_{\mu i}(x)$ は一般に座標 x の関数である．一方場の量 $\{u_A(x)\}$ は，$\{u_A'(x')\}$ に変換されるが，それらは $\delta\omega_i$ によってつぎのように結ばれる.

$$u_A(x) \longrightarrow u_A'(x') = u_A(x) + \bar{\delta}u_A(x) \tag{10. 2. 12}$$

$$\bar{\delta}u_A(x) = \sum_{i=1}^{s} \Psi_{Ai}\delta\omega_i. \tag{10. 2. 13}$$

Ψ_{Ai} は一般に $\{u_B(x)\}$ の組の関数である．われわれがいま考えている無限小変換の中には，アイソ・スピン空間内の回転や，ゲージ変換のように座標変換を伴わないものも含まれている．ただそのときは(10. 2. 11)の $X_{\mu i}$ を零とすればよい.

上の変換の下で，任意の閉じた4次元領域 R_4 にわたる作用積分の変化 δA_{R_4} を求めよう.

$$\begin{aligned}\bar{\delta}A_{\mathrm{R}_4} &= \bar{\delta}\int_{\mathrm{R}_4} d^4x L(u(x), u_{,\mu}(x)) \\ &= \int_{\mathrm{R}_4} d^4x' L(u'(x'), u_{,\mu}'(x')) - \int_{\mathrm{R}_4} d^4x L(u(x), u_{,\mu}(x)).\end{aligned} \tag{10. 2. 14}$$

最後の表式のそれぞれの項の積分は，**幾何学的には同一**の4次元領域 R_4 にわたる．上式の計算に際して，$\int_{\mathrm{R}_4} d^4xL(u'(x'), u_{,\mu}'(x'))$ なる項を第1項から引き，第2項に加えると，つぎのようになる.

$$\bar{\delta}A_{\mathrm{R}_4}=\int_{\mathrm{R}_4}d^4x\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\delta x_\mu\right)L(u(x),u_{,\mu}(x))$$
$$+\int_{\mathrm{R}_4}d^4x\bar{\delta}L(u(x),u_{,\mu}(x)). \qquad (10.2.15)$$

右辺の第1項の導出に際しては，1次の無限小量までを考慮にいれることに注意して，次の結果を用いた.

$$\delta d^4x\equiv d^4x'-d^4x=\prod_\mu(dx_\mu+d\delta x_\mu)-d^4x=d^4x\cdot\frac{\partial}{\partial x_\mu}\delta x_\mu. \qquad (10.2.16)$$

第2項の $\bar{\delta}L$ は,

$$\bar{\delta}L\equiv L(u'(x'),u_{,\mu}'(x'))-L(u(x),u_{,\mu}(x))$$
$$=\sum_A\left\{\frac{\partial L}{\partial u_A}\bar{\delta}u_A+\frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}}\bar{\delta}u_{A,\mu}\right\} \qquad (10.2.17)$$

であるが，ここで $\bar{\delta}u_A$ と(10.2.1)の δu_A の違いに注意する必要がある．すなわち

$$\bar{\delta}u_A(x)=\delta u_A(x)+u_{A,\mu}(x)\delta x_\mu \qquad (10.2.18)$$

の関係にあり，$\bar{\delta}$ の変分に関しては，$\partial/\partial x_\mu$ との交換関係(10.2.2)が成り立たない．したがって(10.2.17)の形では(10.2.8)の導出の過程のように，部分積分によって $\bar{\delta}u_{A,\mu}$ を消去することはできない．そこで $\bar{\delta}L(x)$ をあらためて

$$\bar{\delta}L=\delta L(x)+\frac{\partial L}{\partial x_\mu}\delta x_\mu \qquad (10.2.19)$$

とすることによって，(10.2.15)はつぎのように書きかえられる.

$$\bar{\delta}A_{\mathrm{R}_4}=\int_{\mathrm{R}_4}d^4x\delta L+\int_{\mathrm{R}_4}d^4x\frac{\partial}{\partial x_\mu}(L\delta x_\mu). \qquad (10.2.20)$$

上式の右辺の第1項は，積分領域の違いを除いて(10.2.8)の計算と全く同様に遂行されるが，いまはすでに Euler の運動方程式(10.2.9)は成り立つとしているので，(10.2.8)の第2項に対応する項のみが残る．こうして最終的に

$$\bar{\delta}A_{\mathrm{R}_4}=\int_{\mathrm{R}_4}d^4x\frac{\partial}{\partial x_\mu}\left\{\sum_A\frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}}\delta u_A+L\delta x_\mu\right\}$$
$$=-\int_{\mathrm{R}_4}d^4x\frac{\partial}{\partial x_\mu}\left(\sum_{i=1}^{s}Q_{\mu i}(x)\delta\omega_i\right) \qquad (10.2.21)$$

を得る．ただし

$$Q_{\mu i}(x)\equiv\sum_A\frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}}(u_{A,\sigma}(x)X_{\sigma i}-\Psi_{Ai})-LX_{\mu i}. \qquad (10.2.22)$$

さて系が(*10. 2. 10*), (*10. 2. 12*)の無限小変換の下で不変であるためには, (*10. 2. 21*)の $\bar{\delta}A_{R_4}$ は, 任意の4次元領域 R_4 に対して, また任意の s 個の $\delta\omega_i$ のもとで零となる必要がある. このことから, 全時空点にわたって,

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}Q_{\mu i}(x) = 0 \qquad (i=1, 2, \cdots, s) \qquad (10.\ 2.\ 23)$$

であることが要請される. これは局所的保存式と呼ばれるものである. その物理的意味を調べるため, (*10. 2. 23*)を改めて, 任意の R_4 にわたって積分し, それに Gauss の積分定理を用いて, R_4 の表面積分の形に書きかえる.

$$0 = \int_{R_4} d^4x \frac{\partial}{\partial x_\mu}Q_{\mu i}(x) = \oint_S d\sigma_\mu Q_{\mu i}(x). \qquad (10.\ 2.\ 24)$$

ここに $d\sigma_\mu$ は,

$$d\sigma_\mu \equiv (dx_2dx_3dx_0,\ dx_3dx_1dx_0,\ dx_1dx_2dx_0,\ dx_1dx_2dx_3/i) \qquad (10.\ 2.\ 25)$$

で与えられる4元ベクトルであるが, その内容を具体的に見よう. いま考えている R_4 の表面 S も1つの例であるが, 4次元空間内の3次元**超曲面**(hypersurface)は3つの連続的パラメーター (u, v, w) の関数としての時空点 $x_\mu(u, v, w)$ の集合である. そこでいま次の3階反対称テンソル

$$dS_{\mu\nu\sigma} = \frac{\partial(x_\mu, x_\nu, x_\sigma)}{\partial(u, v, w)}dudvdw \qquad (10.\ 2.\ 26)$$

あるいはそれと等価な4元擬ベクトル

$$d\sigma_\mu = \frac{1}{6}\epsilon_{\mu\nu\sigma\rho}dS_{\nu\sigma\rho} \qquad (10.\ 2.\ 27)$$

を導入する. ϵ は $\epsilon_{1234}=i$ の4階完全反対称テンソルである. (*10. 2. 25*)の $d\sigma_\mu$ は(*10. 2. 27*)のそれにほかならない. (*10. 2. 26*)のヤコビアンの性質から

$$d\sigma_\mu\frac{\partial x_\mu}{\partial u} = d\sigma_\mu\frac{\partial x_\mu}{\partial v} = d\sigma_\mu\frac{\partial x_\mu}{\partial w} = 0 \qquad (10.\ 2.\ 28)$$

すなわち, $d\sigma_\mu$ は, 3次元超曲面内の3つの独立なベクトル $(\partial x_\mu/\partial u,\ \partial x_\mu/\partial v,\ \partial x_\mu/\partial w)$ のすべてと直交する. いま R_4 として, 図10.2に示される2つの超曲面 $\sigma^{(1)}$ と $\sigma^{(2)}$ に画され, 空間的には無限遠におよぶ領域を考える. $\sigma^{(1)}$ と $\sigma^{(2)}$ は, その面積要素 $d\sigma_\mu$ が,

$$\left.\begin{aligned} d\sigma_\mu &= -n_\mu d\sigma \\ d\sigma &\equiv n_\mu d\sigma_\mu \end{aligned}\right\} \qquad (10.\ 2.\ 29)$$

のように，ある‘時間的’な単位ベクトル n_μ $(n_\mu^2=-1)$ に比例する，‘平坦’でかつ‘空間的’な超曲面であるとする．さらに場の量 $u_A(x)$ は空間的無限遠で零になることを仮定すると，*(10.2.24)* から

$$\int_{\sigma^{(1)}} d\sigma_\mu Q_{\mu i}=\int_{\sigma^{(2)}} d\sigma_\mu Q_{\mu i} \qquad (10.2.30)$$

すなわち，連続変換の下での系の不変性の要請から s 個の保存量

$$\bar{Q}_i\equiv\int d\sigma_\mu Q_{\mu i} \qquad (i=1,2,\cdots,s) \qquad (10.2.31)$$

の導かれることが明らかとなった．いま n_μ を $(\boldsymbol{o}, \boldsymbol{i})$ ととれば，

$$\bar{Q}_i=\int d^3\boldsymbol{x}Q_{0i}. \qquad (10.2.31')$$

上の議論では，$\sigma^{(1)}, \sigma^{(2)}$ として平坦な超曲面をえらんだが，実際には平坦である必要はない．ただ後の議論で $\bar{Q}$ が量子力学的観測可能量となるために，σ が‘空間的’，すなわち σ 上の任意の 2 点が互いに空間的であればよい．実際，*(10.2.31)* をそのような σ 上の積分とすると，$\bar{Q}_i$ は一般に超曲面 σ の汎関数 $\bar{Q}_i(\sigma)$ であるが，局所的保存式 *(10.2.23)* の下では，それは σ 面の形に依存しないことは，上の議論から明らかである．ところでその逆が成立する．それを見るため，$\bar{Q}_i(\sigma)$ に対して σ について，つぎのような**汎関数微分**を遂行しよう．それは一般に

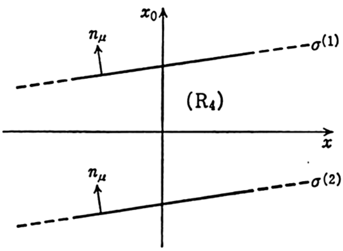


図 10.2

$$\frac{\delta}{\delta\sigma(x)}F(\sigma)=\lim\{F(\sigma')-F(\sigma)\}/\varDelta \qquad (10.2.32)$$

によって定義される．σ と σ' は図 10.3 に示すように x の近傍でのみ微小に異なる 2 つの‘空間的’超曲面で，両者に画された 4 次元微小体積を $\varDelta$ とする．$\bar{Q}_i(\sigma)$ は $F(\sigma)$ の特殊な場合であり，

$$\frac{\delta\bar{Q}_i(\sigma)}{\delta\sigma(x)}=\frac{\partial Q_{\mu i}(x)}{\partial x_\mu} \qquad (10.2.33)$$

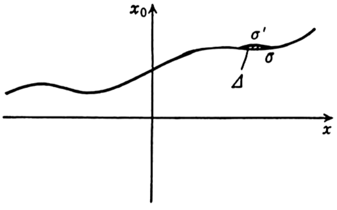


図 10.3

が示される．かくして $\bar{Q}_i(\sigma)$ が σ に依存しない巨視的保存量であれば，(*10. 2. 23*)の局所的保存式が導かれることがわかる．

以上述べた系の連続変換の下での不変性と保存量の存在の関係は，Noether の定理として知られるものである．以下ではいくつかの例について述べる．

(i)　**4次元並進とエネルギー・運動量**　エネルギー・運動量の保存則は，古くから力学の根本法則として位置づけられてきたが，それは4次元時空の等質性，すなわち時間，空間についての並進の下での理論の不変性から導かれる．このときの $\delta\omega_i$ は4個の無限小並進パラメーター ϵ_μ に対応する．

$$\delta\omega_{i=\mu} = \epsilon_\mu \tag{10. 2. 34}$$

$$x_\mu \longrightarrow x_\mu{}' = x_\mu + \epsilon_\mu. \tag{10. 2. 35}$$

したがって(*10. 2. 11*)から

$$X_{\mu i=\nu} = \delta_{\mu\nu}. \tag{10. 2. 36}$$

一方，場については，$u_A(x)$ と $u_A{}'(x')$ は本来幾何学的には同一の時空点の場であり，かつ変換が単なる並進であるから，$\bar{\delta}u_A=0$ すなわち

$$\Psi_{Ai=\mu} = 0. \tag{10. 2. 37}$$

かくして(*10. 2. 22*)の $Q_{\mu i=\nu}$ に対応する量は，正準エネルギー・運動量テンソルと呼ばれる量

$$T_{\mu\nu}(x) = \sum_A \frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}} u_{A,\mu} - L\delta_{\mu\nu} \tag{10. 2. 38}$$

で，系の並進不変性の要請から

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} T_{\mu\nu} = 0 \tag{10. 2. 39}$$

を満たす．(*10. 2. 31*)の $\bar{Q}_{i=\mu}$ に対応して，エネルギー・運動量 P_μ が保存量として導かれる．

$$P_\mu = \int d\sigma_\nu T_{\nu\mu} = \int d^3x T_{0\mu}. \tag{10. 2. 40}$$

さきに注意したように，保存する4元ベクトル P_μ が得られるためには，場の量が空間的無限遠で零になることが必要である．

(ii)　**4次元回転と4次元角運動量**　つぎに，並進を伴わない，いわゆる斉次 Lorentz 変換を考えよう．このとき $\delta\omega_i$ は6個の独立成分をもつ微小反対称テン

ソル $\delta\omega_{\mu\nu}$ である.

$$\delta\omega_{i=(\mu,\nu)} = \delta\omega_{\mu\nu} = -\delta\omega_{\nu\mu} \tag{10.2.41}$$

$$x_\mu \longrightarrow x_\mu' = x_\mu + \delta\omega_{\mu\nu}x_\nu. \tag{10.2.42}$$

したがって

$$X_{\mu i=(\sigma\rho)} = x_\rho\delta_{\mu\sigma} - x_\sigma\delta_{\mu\rho}. \tag{10.2.43}$$

一方，場の変化

$$\bar{\delta}u_A(x) = \sum_{\sigma<\rho} \Psi_{Ai=(\sigma\rho)}\delta\omega_{\sigma\rho} \tag{10.2.44}$$

においては，後に述べる例(§10.3参照)でわかるように，通常の場では $\Psi_{A\sigma\rho}$ は $\{u_A(x)\}$ の線形結合で表現される.

$$\Psi_{A\sigma\rho} = \sum_B S_{A\sigma\rho}{}^B u_B(x). \tag{10.2.45}$$

$S_{A\sigma\rho}{}^B(=-S_{A\rho\sigma}{}^B)$ は場の種類によってきまる定数係数で，スピン行列と呼ばれる. これより(10.2.22)の $Q_{\mu i=(\sigma\rho)}$ に対応して

$$M_{\mu\sigma\rho}(x) = L_{\mu\sigma\rho}(x) + S_{\mu\sigma\rho}(x) \tag{10.2.46}$$

が得られる. ここに

$$L_{\mu\sigma\rho} = x_\rho T_{\mu\sigma} - x_\sigma T_{\mu\rho} \tag{10.2.47}$$

$$S_{\mu\sigma\rho} = -\sum_{A,B}\frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}} S_{A\sigma\rho}{}^B u_B. \tag{10.2.48}$$

系の回転不変性の要請から

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}M_{\mu\sigma\rho} = 0. \tag{10.2.49}$$

また保存量として，4次元角運動量をあらわす反対称テンソル

$$M_{\sigma\rho} = \int d\sigma_\mu M_{\mu\sigma\rho} = \int d^3\boldsymbol{x} M_{0\sigma\rho} = \int d^3\boldsymbol{x}(L_{0\sigma\rho}(x) + S_{0\sigma\rho}) \tag{10.2.50}$$

が得られる. この表現に見られる角運動量の L と S からなる部分は，それぞれ軌道-およびスピン-角運動量に対応する. 実際このことは，それぞれの項が(10.2.42)の δx_μ と(10.2.44)の $\bar{\delta}u_A$ の変分に対応していることからも確かめられる.

ここで補足的注意をしておく. 上の $L_{\mu\sigma\rho}$ の中の正準エネルギー・運動量テンソル $T_{\mu\nu}$ は一般に対称テンソルでないが，以下に導入される新しい対称テンソル $\Theta_{\mu\nu}$ を用いると，$M_{\sigma\rho}$ の表現から S による部分が消去されることがわかる. まず

(*10. 2. 49*)から得られる

$$T_{\sigma\rho}-T_{\rho\sigma}=\frac{\partial}{\partial x_\mu}S_{\mu\sigma\rho} \qquad (10.2.51)$$

に注意して，$T_{\mu\nu}$ にかわって新しく $\Theta_{\mu\nu}$

$$\Theta_{\mu\nu}\equiv T_{\mu\nu}+\frac{\partial}{\partial x_\rho}G_{\rho\mu\nu} \qquad (10.2.52)$$

$$G_{\rho\mu\nu}=\frac{1}{2}(S_{\rho\mu\nu}+S_{\mu\nu\rho}+S_{\nu\mu\rho})=-G_{\mu\rho\nu} \qquad (10.2.53)$$

を定義する．これは $T_{\mu\nu}$ と同じく局所的保存式

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}\Theta_{\mu\nu}=0 \qquad (10.2.54)$$

を満たす．くわしい説明は省くが，(*10. 2. 53*)の G の反対称性に注意することによって，P_μ と $M_{\mu\nu}$ は新しい $\Theta_{\mu\nu}$ によって，

$$P_\nu=\int d\sigma_\mu\Theta_{\mu\nu} \qquad (10.2.40')$$

$$M_{\sigma\rho}=\int d\sigma_\mu(x_\rho\Theta_{\mu\sigma}-x_\sigma\Theta_{\mu\rho}) \qquad (10.2.50')$$

と表現されることがわかる．

上に述べた4次元並進と回転は，全体として非斉次 Lorentz 変換と呼ばれるが，その下での理論の不変性から10個の保存量 P_μ, $M_{\mu\nu}$ が導かれることがわかった．一方この**不変性の条件**を Lagrange 密度関数の形で見てみる．4次元並進と回転の下では $(\partial/\partial x_\mu)\delta x_\mu=0$ のため，(*10. 2. 15*)の右辺の第1項は零である．したがって系の不変性は，L そのものの不変性

$$\bar{\delta}L=L(u'(x'),u_{,\mu}'(x'))-L(u(x),u_{,\mu}(x))=0 \qquad (10.2.55)$$

を意味することがわかる．

(iii) **スケール変換**　つぎに時空間の尺度を一様にかえるスケール変換を考えよう．ϵ を再び無限小パラメーターとすると，

$$x_\mu\longrightarrow x_\mu'=x_\mu/(1+\epsilon)=x_\mu-\epsilon x_\mu. \qquad (10.2.56)$$

場 $u_A(x)$ も，$\hbar=c=1$ の単位のもとで，それぞれ固有の長さのベキの次元をもつが，それを D_A とすると，

$$u_A(x)\longrightarrow u_A'(x')=(1+\epsilon)^{D_A}u_A(x)=(1+D_A\epsilon)u_A(x). \qquad (10.2.57)$$

これより $Q_{\mu t}$ に対応する4元カレントは，

$$S_\mu(x) = -\sum_A \frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}}(D_A u_A + u_{A,\sigma}x_\sigma) + Lx_\mu$$

$$= -T_{\mu\sigma}x_\sigma - \sum_A D_A \frac{\partial L}{\partial u_{A,\mu}} u_A \qquad (10.2.58)$$

この場合も $M_{\mu\nu}$ のときのように，第1項の $T_{\mu\sigma}$ を新たなエネルギー・運動量テンソル $\Theta_{\mu\nu}$ でおきかえると，一定の条件の下で第2項が消去される．しかしここではこれ以上立ちいらない．

(iv) **ゲージ変換と4元カレント**　最後の例として，座標変換を伴わない，場の定数位相変換を考えよう．

$$u_A(x) \longrightarrow u_A'(x') = e^{i\lambda_A \delta\omega} u_A(x). \qquad (10.2.59)$$

ここに $\delta\omega$ は無限小パラメーター，λ_A は各場 u_A に固有な定数——チャージと呼ばれる——で，実数の場は $\lambda_A=0$ である．これから導かれる $Q_{\mu t}$ に対応する4元カレント $j_\mu(x)$ は，

$$j_\mu(x) = -i\sum_A \lambda_A \frac{\partial L(x)}{\partial u_{A,\mu}} u_A(x). \qquad (10.2.60)$$

系がこのゲージ変換の下で不変であれば電流保存などでよく知られたカレント保存式

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} j_\mu(x) = 0 \qquad (10.2.61)$$

および保存量として，全チャージ(total charge)

$$Q = \int d\sigma_\mu j_\mu(x) = \int d^3x j_0(x). \qquad (10.2.62)$$

が得られる．

§10.3　場の正準量子化

a)　正準変数と量子化

§10.1, e)の議論にそって考えると，場の量子化に際して，はじめに系の正準変数を見い出す必要がある．§10.1, e)では一般化座標を選ぶのに適当な直交関数系列 $\{\varphi_i(\boldsymbol{x})\}$ を用いて $\psi_{\mathrm{cl.}}(\boldsymbol{x}, t)$ を展開し，その展開係数 $c_i(t)$ を一般化座標とした．しかしここでは，§10.2, a)で Lagrange 運動方程式を導いたときのように，

場の量 $u_A(\boldsymbol{x}, x_0)$ 自身を $r \equiv (A, \boldsymbol{x})$ をラベルとする一般化座標として採用する．ただし以下の量子化の議論は連続的なラベルのもとでは取扱いがむつかしいので，3次元空間を微小な体積素片に分割し，その素片を添字 s で番号づけして，上のラベルを離散的な $r \equiv (A, s)$ に変える．各素片の平均位置を $\boldsymbol{x}^{(s)}$，体積を $\delta^3\boldsymbol{x}^{(s)}$ とする．このとき場の量に対しては

$$\left.\begin{aligned} &u_A(\boldsymbol{x}, x_0) \longrightarrow u_A{}^s(x_0) \\ &\frac{\partial}{\partial x_i}u_A(\boldsymbol{x}, x_0) \longrightarrow (u_A{}^{s+1}(x_0) - u_A{}^s(x_0))/\delta x_i \\ &\frac{\partial}{\partial x_0}u_A(\boldsymbol{x}, x_0) \longrightarrow \frac{\partial}{\partial x_0}u^s(x_0) \end{aligned}\right\} \qquad (10.3.1)^{\dagger}$$

のおきかえを行うと，(10.2.4)の $\bar{L}$ はつぎのように書きかえられる．

$$\bar{L} = \sum_s \delta^3\boldsymbol{x}^s L^{(s)} \qquad (10.3.2)$$

ただし

$$L^{(s)} = L\left(u^s(x_0),\ (u^{s+1}(x_0) - u^s(x_0))/\delta x_i,\ \frac{\partial}{\partial x_0}u^s(x_0)\right). \qquad (10.3.3)$$

ここで質点系の力学の場合と同様に，一般化運動量 $\{\Pi_A{}^s(x_0)\}$ をつぎのように定義する．

$$\Pi_A{}^s(x_0) = \partial\bar{L}/\partial u_{A,0}{}^s = \delta^3\boldsymbol{x}^s\pi_A{}^s(x_0) \qquad (10.3.4)$$

$$\pi_A{}^s(x_0) \equiv \partial L^{(s)}/\partial u_{A,0}{}^s. \qquad (10.3.5)$$

さて $\{u_A{}^s(x_0), \pi_A{}^s(x_0)\}$ の変数の組が，正準変数であるためには，(10.3.4)を解いて $(\partial/\partial x_0)u_A{}^s(x_0)$ をこれらの変数で書き表す必要がある．それが可能であるためには

$$|\partial^2\bar{L}/\partial u_{A,0}{}^s\partial u_{A',0}{}^{s'}| \neq 0 \qquad (10.3.6)$$

が，必要条件となる．上の行列式が零となる，いわゆる‘特異な’L においては，$(u_A{}^s, \Pi_A{}^s)$ の変数は，相互に独立でなく，この行列式の位数に応じて，それらの間にいくつかの**拘束条件式**が生ずる．その場合は，以下の量子化の議論に特殊な注意が絶えず必要で，それについてのくわしい議論は第11章で行われる．したがって以下では(10.3.6)の条件式が成り立つものとして話を進める．

系のハミルトニアンは

† $s+1$ は素片 s に隣接するある1つの素片を象徴的にさす．

$$\bar{H}_\delta = \sum_s \delta^3 \boldsymbol{x}^s \Big(\sum_A \pi_A{}^s(x_0) u_{A,0}{}^s(x_0) - L^{(s)}\Big) \tag{10.3.7}$$

で与えられ，$\delta^3\boldsymbol{x}^s \to 0$ の極限においては

$$\bar{H} = \int d^3\boldsymbol{x} H(x) \tag{10.3.8}$$

$$H(x) \equiv \sum_A \pi_A(x) u_{A,0}(x) - L = T_{00} \tag{10.3.9}$$

となって，(*10.2.40*) の P_0 に一致する．(*10.3.9*) の $H(x)$ は，ハミルトニアン密度と呼ばれる．Hamilton の正準運動方程式は，$\bar{H}_\delta$ の中の $u_{A,0}{}^s$ を正準変数で書きかえ，Poisson 括弧を通じて，

$$\left.\begin{aligned} \frac{d}{dx_0} u_A{}^s(x_0) &= \{u_A{}^s(x_0), \bar{H}_\delta\}_{\text{Poiss.}} = \frac{\partial \bar{H}_\delta}{\partial \Pi_A{}^s(x_0)} \\ \frac{d}{dx_0} \Pi_A{}^s(x_0) &= \{\Pi_A{}^s(x_0), \bar{H}_\delta\}_{\text{Poiss.}} = \frac{-\partial \bar{H}_\delta}{\partial u_A{}^s(x_0)} \end{aligned}\right\}. \tag{10.3.10}$$

ここで $\delta^3\boldsymbol{x}^s \to 0$ の極限をとると

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_0} u_A(x) &= \frac{\delta \bar{H}}{\delta \pi_A(x)} \\ \frac{\partial}{\partial x_0} \pi_A(x) &= \frac{-\delta \bar{H}}{\delta u_A(x)} \end{aligned}\right\}. \tag{10.3.11}$$

上式の右辺の微分表現は，$\bar{H}$ を関数 $u_A(x), \pi_A(x)$ の関数と見ての汎関数微分で，次の内容をもつ．

$$\begin{aligned} \frac{\delta \bar{H}}{\delta u_A(x)} &\equiv \lim_{\delta \to 0} \frac{1}{\delta^3 \boldsymbol{x}^s} \frac{\partial \bar{H}_\delta}{\partial u_A{}^s(x_0)}\bigg|_{\boldsymbol{x}^s = \boldsymbol{x}} \\ &= \frac{\partial H(x)}{\partial u_A(x)} - \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial H(x)}{\partial u_{A,i}(x)}. \end{aligned} \tag{10.3.12}$$

同様に

$$\frac{\delta \bar{H}}{\delta \pi_A(x)} \equiv \lim_{\delta \to 0} \frac{1}{\delta^3 \boldsymbol{x}^s} \frac{\partial \bar{H}_\delta}{\partial \pi_A{}^s(x_0)} = \frac{\partial H(x)}{\partial \pi_A(x)}. \tag{10.3.13}$$

つぎに**量子化**の問題に移る．§10.1, e) で述べたように‘正準量子化’の方法は一意的でないが，ここでは Bose 統計と Fermi 統計の場合に限る．このとき，(*10.1.67*) に対応して，**Bose 統計の場合**

$$\left.\begin{aligned} [u_A{}^s(x_0), \Pi_{A'}{}^{s'}(x_0)] &= i\delta_{AA'}\delta_{ss'} \\ [u_A{}^s(x_0), u_{A'}{}^{s'}(x_0)] &= [\Pi_A{}^s(x_0), \Pi_{A'}{}^{s'}(x_0)] = 0 \end{aligned}\right\} \tag{10.3.14}$$

の交換関係を設定する．ここで $\delta^3\boldsymbol{x}^s\to 0$ の極限をとると(10. 3. 4)に注意して，

$$\left.\begin{aligned}&[u_A(\boldsymbol{x},x_0),\pi_{A'}(\boldsymbol{x}',x_0)]=i\delta_{AA'}\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\\&[u_A(\boldsymbol{x},x_0),u_{A'}(\boldsymbol{x}',x_0)]=[\pi_A(\boldsymbol{x},x_0),\pi_{A'}(\boldsymbol{x}',x_0)]=0\end{aligned}\right\}.\qquad(10.3.15)$$

$\pi_A(\boldsymbol{x},x_0)$ は(10. 3. 5)の $\pi_A{}^s(x_0)$ の極限で

$$\pi_A(\boldsymbol{x},x_0)=\partial L/\partial u_{A,0}(x).\qquad(10.3.16)$$

また $\lim\limits_{\delta\to\infty}\delta_{ss'}/\delta^3\boldsymbol{x}^s=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$ (ただし $\boldsymbol{x}^s=\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}^{s'}=\boldsymbol{x}'$) とした．全く同様に，(10. 1. 68)に対応して，**Fermi 統計の場合**には

$$\left.\begin{aligned}&\{u_A(\boldsymbol{x},x_0),\pi_{A'}(\boldsymbol{x}',x_0)\}=i\delta_{AA'}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\\&\{u_A(\boldsymbol{x},x_0),u_{A'}(\boldsymbol{x}',x_0)\}=\{\pi_A(\boldsymbol{x},x_0),\pi_{A'}(\boldsymbol{x}',x_0)\}=0\end{aligned}\right\}\qquad(10.3.17)$$

となる．

つぎに個々の場 $u_A(x)$ にいずれの統計を課すかが問題となるが，それは次節で明らかにされるように，それぞれの場のスピンの大きさが整数か半整数かに関係する．

b) 正準運動方程式と古典論との対応

ここで(10. 3. 15)あるいは(10. 3. 17)で量子化された場の時間的変化を考えよう．古典論での場はもちろん(10. 3. 11)の Hamilton の運動方程式に従うが，量子化された場が上で導入した交換関係と矛盾することなしに，この方程式に従うという保証はない．まず方程式中の $\bar{H}$ は正準変数の関数であるが，量子論に移るとき $\bar{H}$ が Hermite 演算子となるよう，それらの積の順序が配慮される必要がある．つぎに汎関数微分 $\delta\bar{H}/\delta u_A$, $\delta\bar{H}/\delta\pi_A$ の量子論的な定義を明白にする必要がある．実際微分演算にあたって，$\bar{H}$ の中の u_A,π_A は $\delta u_A,\delta\pi_A$ の変分を受けるが，後者の $\delta u_A,\delta\pi_A$ は $\{u_A\}$, $\{\pi_A\}$ とどのような交換関係をもつかを定めないと，微係数がきまらない．

そこでわれわれは一般に時間を陽に含まない正準変数の関数 $F(x_0)$ に対して，質点の量子力学でよく知られる Heisenberg の運動方程式(§3. 3)

$$\frac{d}{dx_0}F(x_0)=-i[F(x_0),\bar{H}]\qquad(10.3.18)$$

が成立することを**要請する**ことにする．そうすると，場が **Bose 統計**に従う場合には，その交換関係(10. 3. 15)を(10. 3. 18)の右辺に適用することによって，Hamilton の運動方程式がその形を保持して成り立つことがわかる．すなわち

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x_0}u_A(x) &= -i[u_A(x), \bar{H}] = \frac{\delta\bar{H}}{\delta\pi_A}\\ \frac{\partial}{\partial x_0}\pi_A(x) &= -i[\pi_A, \bar{H}] = \frac{-\delta\bar{H}}{\delta u_A}\end{aligned}\right\}. \tag{10.3.19}$$

ただし汎関数微分に際して，$\delta u_A, \delta\pi_A$ は $\{u_A\}, \{\pi_A\}$ と可換として上式の最後の等式が成り立つ．つぎに **Fermi 統計**に従う場について見ると，(*10. 3. 19*)の最初の等式は，(*10. 3. 18*)の**要請**であるが，そこに現れる u_A, π_A と $\bar{H}$ の**負の交換関係**の計算を遂行するためには，それらをよく知られた2つの恒等式

$$\left.\begin{aligned}[A, BC] &= [A, B]C+B[A, C]\\ [A, BC] &= \{A, B\}C-B\{A, C\}\end{aligned}\right\} \tag{10.3.20}$$

を適当に用いて，正準変数の間の**正の交換関係**に帰着させる必要がある．簡単な考察から，これが可能なためには，$\bar{H}$ が Fermi 統計に従う場の偶数個の積からなればよいことがわかる．実際，そのような $\bar{H}$ の構造は，次節で見るようにスピンと統計の関係からつねに保証されている．一方汎関数微分においては，δu_A, $\delta\pi_A$ は $\{u_A\}, \{\pi_A\}$ とすべて反可換 ($\{\pi_A, \delta u_A\}=0$ 等を意味する) として，δu_A は各項の右端に，$\delta\pi_A$ は各項の左端に移行してその微係数 $\delta\bar{H}/\delta u_A, \delta\bar{H}/\delta\pi_A$ をそれぞれ定義すれば，(*10. 3. 19*)の最後の等式が成り立つことが確かめられる．

Heisenberg の運動方程式(*10. 3. 18*)は，$F(x_0)$ の時間的変化がつぎのようにユニタリー変換によっていることを示している．

$$F(x_0) = e^{i\bar{H}(x_0-\bar{x}_0)}F(\bar{x}_0)e^{-i\bar{H}(x_0-\bar{x}_0)}. \tag{10.3.21}$$

したがって場の交換関係(*10. 3. 15*)あるいは(*10. 3. 17*)は，ある時刻に成立すれば，他の時刻で自動的に保証されている．

c) 量子化された場の無限小変換と生成子

ここで(*10. 3. 18*)を見ると，系のハミルトニアン $\bar{H}$ は無限小時間推進の生成子† (generator) の役割をしていることがわかる．一方 $\bar{H}$ は§10.2の Noether の定理で導いた(*10. 2. 31*)の $\bar{Q}_i$ の一員である．したがって $\bar{H}$ のみでなく，$\bar{Q}_i$ 一般が，量子論に移れば量子化された場の無限小変換(*10. 2. 12*)の生成子としての性質を備えたオブザーバブルとなることが推測される．そこでまず Bose 統計の

† 本巻の他の章では generator に生成演算子という訳語が使われている．本章ならびに次章では，その言葉を creation operator にあてるので，混同を避けるため，生成子とした．

場合について，$i[u_A(x), \bar{Q}_i(\alpha)]$ を計算してみる．ただし，σ は x_μ を通る任意の‘空間的’超曲面でよいが，ここでは簡単のため $\bar{Q}_i(x_0)=\int d^3x' Q_{0i}(x', x_0)$ とする．$\bar{H}$ に対する(10.3.18)にならって，

$$i[u_A(x), \bar{Q}_i(x_0)] = -\frac{\delta \bar{Q}_i(x_0)}{\delta \pi_A(x)} = -\frac{\partial Q_{0i}(x)}{\partial \pi_A(x)}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \pi_A(x)}\left\{\sum_{A'} \pi_{A'}(x)(-\Psi_{A'i}+u_{A',\sigma}X_{\sigma i})-LX_{0i}\right\}$$

$$= \left(\Psi_{Ai}-\frac{\partial u_A}{\partial x_\sigma}X_{\sigma i}\right)-\left(\sum_{A'} \pi_{A'}\frac{\partial}{\partial \pi_A}u_{A',0}-\frac{\partial L}{\partial \pi_A}\right)X_{0i}.$$

ここで $\partial\Psi_{A'i}/\partial\pi_A(x)=0$ を用いた．最後の式の第2項の括弧内の量は恒等的に零であることに注意すると，最終的に

$$i\left[u_A(x), \sum_i \bar{Q}_i(x_0)\delta\omega_i\right] = \delta u_A(x) \qquad (10.3.22)$$

を得る．ただし右辺の $\delta u_A(x)$ は

$$\delta u_A(x) = u_A'(x)-u_A(x) = \sum_i (\Psi_{Ai}-u_{A,\sigma}X_{\sigma i})\delta\omega_i \qquad (10.3.23)$$

であって，(10.2.13)あるいは(10.2.18)の $\bar{\delta}u_A(x)=u_A'(x')-u_A(x)$ との違いに注意すべきである．

Fermi 統計に従う場に対しても，b)で $\bar{H}$ に対して要請したように $\bar{Q}_i$ が Fermi 統計に従う場の偶数個の積からなる場合には，上の関係式はそのまま成り立つ．

(10.3.22)は，またつぎの形に書くことができる．

$$e^{i\sum_i \bar{Q}_i(x_0)\delta\omega_i}u_A(x)e^{-i\sum_i \bar{Q}_i(x_0)\delta\omega_i} = u_A'(x) \qquad (10.3.24)$$

すなわち，$\bar{Q}_i$ がオブザーバブルとして Hermite 演算子であれば，$u_A'(x)$ と $u_A(x)$ はユニタリー変換によって結ばれ，$\bar{Q}_i$ はその生成子をなしている．また上の議論からわかるように，$\bar{Q}_i(x_0)$ の生成子としての性質は，それが保存量であるなしにかかわらず成り立つことに注意する必要がある．

(10.3.24)の具体例として，§10.2の(i)，(ii)で考察した無限小 **Lorentz 変換**

$$x_\mu \longrightarrow x_\mu' = x_\mu+\epsilon_\mu+\delta\omega_{\mu\nu}x_\nu \qquad (10.3.25)$$

を考えると，それに対応するユニタリー演算子は

$$U(\epsilon, \delta\omega) = \exp i\left(P_\mu\epsilon_\mu+\frac{1}{2}M_{\mu\nu}\delta\omega_{\mu\nu}\right) \qquad (10.3.26)$$

となる．場の量 $u_A(x)$ は，

$$
\begin{aligned}
&U(\epsilon, \delta\omega)\,u_A(x)\,U^{-1}(\epsilon, \delta\omega)\\
&\quad = u_A'(x)\\
&\quad = \left(1-\epsilon_\mu\frac{\partial}{\partial x_\mu}\right)u_A(x)+\frac{1}{2}\delta\omega_{\sigma\rho}\sum_B\left\{\delta_{AB}\left(x_\sigma\frac{\partial}{\partial x_\rho}-x_\rho\frac{\partial}{\partial x_\sigma}\right)+S_{A\sigma\rho}{}^B\right\}u_B(x)
\end{aligned}
\tag{10.3.27}
$$

のように変換される．この最後の表式は，$U(\epsilon, \delta\omega)$ が実際に4次元空間内の並進，軌道回転およびスピン回転による場の変化を生成することを示している．その際の並進，回転の生成子 $P_\mu, M_{\mu\nu}$ は，また相互に，つぎのような閉じた交換関係——いわゆる代数的**環**を構成している．

$$
[P_\mu, P_\nu] = 0 \tag{10.3.28}
$$

$$
[M_{\mu\nu}, M_{\lambda\sigma}] = i(\delta_{\mu\sigma}M_{\lambda\nu}+\delta_{\mu\lambda}M_{\nu\sigma}+\delta_{\nu\sigma}M_{\mu\lambda}+\delta_{\lambda\nu}M_{\sigma\mu}) \tag{10.3.29}
$$

$$
[P_\lambda, M_{\mu\nu}] = -i(P_\nu\delta_{\mu\lambda}-P_\mu\delta_{\nu\lambda}). \tag{10.3.30}
$$

左辺の交換関係において，一方を生成子と見れば，(10.3.28)は P_μ が並進不変な量であること，(10.3.29)と(10.3.30)はそれぞれ $M_{\mu\nu}, P_\lambda$ が4次元回転での2階のテンソルおよびベクトルであることを示している．

上の交換関係を満たす $P_\mu, M_{\mu\nu}$ の**表現**は，Lorentz群の表現を与えるが，それについては本講座第10巻『素粒子論』第12章にゆずる．

§10.4　自由場の量子論

われわれが実際に関心をもつ量子化された場の方程式は，一般に非線形な相互作用項を含むのがつねで，それは自然界の構成子間の複雑な相互作用を反映している．一方われわれが，個々の素粒子——それらがさらに要素的なものからできているかどうか別として——を識別する場合，それらが相互作用を通じてもつ属性——たとえば強弱相互作用の有無，電荷などのほかに，むしろ相互作用をはなれた自由粒子像に結びついた質量とかスピンの概念が重要になる．実際，ほとんどの素粒子は近似的に自由粒子として理解してよい運動状態をもつものとして，これまでの場の理論は取扱われてきた．すなわちそれは摂動論的な描像と呼ばれるもので，まず自由場の量子論をつくり，それに相互作用の影響を摂動論的にとりいれてゆく方法である．それは相互作用が特殊な構造をもち，かつ相互作用定

数の小さい量子電磁気学において，めざましい成功を収めた．最近はいろいろな分野で場の理論の非摂動論的なアプローチが試みられているが，しかしそこでも基本的な概念は自由場の量子論に負っている．

上述のように，自由場は相互作用を消した仮想的世界で考えられているので，電子も μ 中間子も核子も，考えうる内部構造を無視すれば，質量値の違いを除いて共通のスピン 1/2 の Dirac の波動方程式によって記述される．すなわち自由場の属性は上で述べたように，ほとんど Lorentz 変換の下での変換性の違い――すなわち Lorentz 群の表現の多様性に帰着され，**質量**と**スピン**によって特徴づけられる(本講座第 10 巻『素粒子論』第 12 章参照)．

この節でははじめにスピン 0，有限質量 m $(=\hbar\kappa/c$ とするとき，κ^{-1} は Compton 波長)のスカラー場を中心にして，前節の量子化の内容を具体的に検討し，つづいてスピン 1/2 の Dirac 場について簡単に述べる．輻射場の量子論は，つぎの章の多時間理論の考察の中で扱われる．

a) スカラー場の理論

スカラー場に対する，いわゆる Klein-Gordon 型波動方程式

$$(\Box-\kappa^2)\phi(x)=0 \qquad \left(\Box\equiv\frac{\partial^2}{\partial {x_i}^2}-\frac{\partial^2}{\partial {x_0}^2}\right) \tag{10. 4. 1}$$

は，歴史的にはすでに de Broglie が物質波に対して設定したものである．その後，Schrödinger, Klein, Pauli, Weisskopf など多くの人々によって研究された．この簡単な 2 階の相対論的微分方程式に従うスカラー場は，§10. 1 で述べたように，確率振幅としての de Broglie 波としては最終的に排除され，むしろ湯川理論(1935 年)に登場する π 中間子に対する量子化された場として現実性を獲得することになった．π 中間子は，空間反転の下で擬スカラーの振舞いをもつが，これとスカラー中間子との違いは相互作用を通じてのみ生ずるもので，両者とも自由場としては(*10. 4. 1*)に従う．スカラー中間子の候補としては，σ 中間子(～970 MeV) などいくつか知られている(本講座第 10 巻『素粒子論』第 1 章の素粒子の表を参照)．

(*10. 4. 1*)を Euler 方程式として導く Lagrange 密度関数は，

$$L(x)=-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\phi\right)^2-\frac{1}{2}\kappa^2\phi^2. \tag{10. 4. 2}$$

ただし $\phi(x)$ は実数関数とし，量子化されるとき Hermite 演算子となる．$\phi(x)$ の正準共役量 $\pi(x)$ は，

$$\pi(x) = \frac{\partial L}{\partial \phi_{,0}} = \frac{\partial}{\partial x_0}\phi. \tag{10.4.3}$$

で，ハミルトニアン $\bar{H}$ は

$$\bar{H} = \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{x}\{\pi^2(x)+(\nabla\phi)^2+\kappa^2\phi^2\}. \tag{10.4.4}$$

量子化に際しては，Bose 統計と Fermi 統計の可能性があるが，後者の可能性は後に検討するとして，ここでは **Bose 統計**を採用する．

$$\left.\begin{aligned} &[\phi(\boldsymbol{x}, x_0), \pi(\boldsymbol{x}, x_0)] = i\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \\ &[\phi(\boldsymbol{x}, x_0), \phi(\boldsymbol{x}', x_0)] = [\pi(\boldsymbol{x}, x_0), \pi(\boldsymbol{x}', x_0)] = 0 \end{aligned}\right\}. \tag{10.4.5}$$

量子化された $\phi(x)$，$\pi(x)$ は Hermite 演算子であり，(*10.4.4*)の $\bar{H}$ は，そのままの形で，Hermite 演算子である．Heisenberg の運動方程式(*10.3.18*)は，

$$\left.\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial x_0}\phi(x) = \delta\bar{H}/\delta\pi = \pi(x) \\ &\frac{\partial}{\partial x_0}\pi(x) = -\frac{\delta\bar{H}}{\delta\phi} = \Delta\phi(x)-\kappa^2\phi(x) \end{aligned}\right\} \tag{10.4.6}$$

となって，(*10.4.1*)と一致する．上の汎関数微分において，$\delta\phi$, $\delta\pi$ は ϕ, π と可換としている．

つぎに同時刻における場の交換関係(*10.4.5*)の知識から，任意の相異なる時刻における場の交換関係を求めよう．このことは，実際つぎの事によって可能である．いま考えているのは自由場であり，かつ時間について2階の微分方程式であるから，以下で見るように任意の時刻の場の値は，与えられたある時刻での場の値，およびその1階時間微分の知識によって定まる．まずこのことを検べよう．

初期値問題と不変 Δ 関数　(*10.4.1*)の Klein-Gordon 方程式の一般解を求めるのに，斉次 Lorentz 変換の下で不変(以後簡単に相対論的に不変ということがある)な c 数関数解 $G(x)$ の構造をしらべよう．

$$(\Box-\kappa^2)G(x) = 0. \tag{10.4.7}$$

それの Fourier 展開は，一般に

$$G(x) = \frac{-i}{(2\pi)^3}\int d^4k G(k)e^{ik_\mu x_\mu} \tag{10.4.8}$$

と書けるが，相対論的不変性 $G(x')=G(x)$ を満たす独立な解としては，定数因子を除いて，つぎの2つに限られる．

$$G(k)=\Delta(k)=\epsilon(k_0)\delta(k_\mu{}^2+\kappa^2) \qquad (10.4.9)$$

$$=\Delta^{(1)}(k)=i\delta(k_\mu{}^2+\kappa^2). \qquad (10.4.10)$$

(10.4.10)が相対論的に不変であることは明らかである．それに対して(10.4.9)は k_0 の符号関数 $\epsilon(k_0)$ を含むが，k_μ が‘時間的’ベクトルであれば，斉次Lorentz変換の下で $\epsilon(k_0)$ は不変である．したがって **κ が実数**である限り，$\Delta(k)$ も不変である．このことは逆に κ が虚数——対応する虚数質量をもつ仮想的粒子は，**タキオン**と呼ばれている——の時は，Fourier展開可能な不変関数としては，$\Delta^{(1)}(k)$ のみが許されることを意味する．(10.4.9), (10.4.10)から $\Delta(x)$, $\Delta^{(1)}(x)$ 関数のつぎの偶奇性が示される．

$$\Delta(x)=-\Delta(-x) \qquad (10.4.11)$$

$$\Delta^{(1)}(x)=\Delta^{(1)}(-x). \qquad (10.4.12)$$

これらの関数の具体的な形は，

$$\delta(k_\mu{}^2+\kappa^2)=\frac{1}{2\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2}}\{\delta(k_0-\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2})+\delta(k_0+\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2})\}$$

を用いて，つぎのように書かれる．

$$\Delta(x)=\frac{-1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}d^3\boldsymbol{k}\frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2}}\sin\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2}x_0e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}$$

$$=\frac{-1}{2\pi}\epsilon(x_0)\delta(x_\mu{}^2)+\frac{\kappa^2}{4\pi\sqrt{-x_\mu{}^2}}\theta(-x_\mu{}^2)\epsilon(x_0)J_1(\kappa\sqrt{-x_\mu{}^2}) \qquad (10.4.13)$$

$$\Delta^{(1)}(x)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\boldsymbol{k}\frac{1}{\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2}}\cos\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2}x_0e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}$$

$$=\theta(x_\mu{}^2)\frac{\kappa}{2\pi^2\sqrt{x_\mu{}^2}}K_1(\kappa\sqrt{x_\mu{}^2})-\theta(-x_\mu{}^2)\frac{\kappa}{4\pi\sqrt{-x_\mu{}^2}}N_1(\kappa\sqrt{-x_\mu{}^2}). \qquad (10.4.14)$$

ただし $\theta(a)$ は，

$$\left.\begin{aligned}\theta(a)&=1 \qquad a>0\\ &=0 \qquad a<0\end{aligned}\right\}. \qquad (10.4.15)$$

J_n, N_n, K_n はよく知られた各種の Bessel 関数である．上の表現から，$\Delta(x)$ はつぎの重要な性質をもつことがわかる．

$$\Delta(x)=0, \qquad x_\mu{}^2=\boldsymbol{x}-x_0{}^2>0 \tag{10.4.16}$$

$$\left.\frac{\partial\Delta(x)}{\partial x_0}\right|_{x_0=0}=-\delta^3(\boldsymbol{x}). \tag{10.4.17}$$

すなわち Δ 関数は，Minkowsky 空間で，‘空間的’領域で零，光円錐上で δ 関数的な特異性および $\theta(-x_\mu{}^2)\epsilon(x_0)$ の形の非連続性をもつ．また $\kappa=0$ のときは，‘時間的’領域でも零になる．

上で導入された Δ 関数を用いると，Klein-Gordon 方程式の初期値問題は，つぎのように定式化される．

$$\begin{aligned}\phi(\boldsymbol{x},x_0)&=\int d\sigma_\mu{}'\Delta(x-x')\frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial x_\mu{}'}\phi(x')\\&\equiv\int d\sigma_\mu{}'\left\{\Delta(x-x')\frac{\partial}{\partial x_\mu{}'}\phi(x')-\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu{}'}\Delta(x-x')\right)\phi(x')\right\}.\end{aligned} \tag{10.4.18}$$

上式を証明するのに，まず右辺が σ' のとり方に無関係であることをみよう．このことは実際(*10. 2. 32*)の意味の汎関数微分を適用し，それが零になることで容易に確かめられる．そこでつぎにこの σ' として，x_0' を固定した平坦な面をとると，

$$\begin{aligned}\phi(\boldsymbol{x},x_0)=\int d^3\boldsymbol{x}'\Big\{&\Delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',x_0-x_0')\frac{\partial}{\partial x_0'}\phi(\boldsymbol{x}',x_0')\\&-\left(\frac{\partial}{\partial x_0'}\Delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',x_0-x_0')\right)\phi(\boldsymbol{x}',x_0')\Big\}.\end{aligned} \tag{10.4.18'}$$

ここでさらに $x_0'=x_0$ にえらぶと，右辺の第1項は，(*10. 4. 16*)のため消え，第2項は(*10. 4. 17*)のために $\phi(\boldsymbol{x},x_0)$ となって，結局始めの(*10. 4. 18*)が証明されたことになる．

さて(*10. 4. 18*)の表現は，図10.4に見るように，x_μ における場の値は，x_μ を原点とした過去圏(あるいは未来圏)内に画された，任意の空間的超曲面 σ' 上の場の値およびその時間的方向(超曲面に垂直方向)の微分によって表されることを意味する．このことは，Klein-Gordon 型波動方程式に従う波の伝播が，**相対論的因果律**を満たすことを示している．

上の結果を用いると，相異なる時刻での場の交換関係が，同時刻のそれに関係

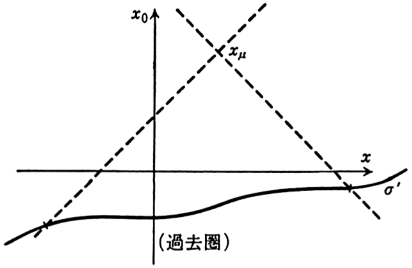


図 10.4

づけられる．後者に対してさきの Bose 統計による交換関係(*10. 4. 5*)を用いると，最終的に

$$[\phi(\boldsymbol{x}, x_0), \phi(\boldsymbol{x}', x_0')] = i\Delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}', x_0-x_0') \qquad (10.4.19)$$

が得られる．上の結果は，相互に‘空間的’な関係にある 2 点の場の量は可換であることを示している．したがってこのことはまた‘空間的’な 2 点での物理量は，同時観測可能であることを保証する．つまりそれは一方の観測の影響が光速以上の速さで伝播して，他方の観測を攪乱することのないことを意味する．

ところでさきの初期値問題の式(*10. 4. 18*)は，場 ϕ が量子化されているといないに拘らず，また量子化されているときはその統計性にかかわりなく成り立つので，もし(*10. 4. 5*)で Fermi 型に量子化されていたとするならば，

$$\{\phi(\boldsymbol{x}, x_0), \phi(\boldsymbol{x}', x_0')\} = i\Delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}', x_0-x_0') \qquad (10.4.20)$$

の結果が導かれたはずである．しかしこの場合には明らかに矛盾に逢着する．すなわち Δ 関数は(*10. 4. 11*)に見るように，$\boldsymbol{x}$ について奇関数であるのに対し，(*10. 4. 20*)の左辺は x の偶関数である．こうしてまずスカラー場に対して **Fermi 統計**を要求すると，その Klein-Gordon 型の運動法則と**矛盾**することが明らかとなった．

つぎに個数表示に移ろう．その最も簡単なものとして運動量表示をとる．(*10. 4. 1*)の解としての $\phi(x)$ は，つぎのように Fourier 展開される．

$$\begin{aligned}\phi(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d^4k U(\boldsymbol{k}, k_0)\delta(k_\mu{}^2+\kappa^2)e^{ik_\mu x_\mu}\\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int \frac{d^3\boldsymbol{k}}{2\omega(k)}\{U(\boldsymbol{k}, \omega)e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}-\omega x_0)}+U(-\boldsymbol{k}, -\omega)e^{-i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}-\omega x_0)}\}.\end{aligned}$$

(*10. 4. 21*)

ただし $\omega(k)$ (あるいは ω と略記する)は,

$$\omega(k) = \sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa^2}. \qquad (10.4.22)$$

$\phi(x)$ がエルミートであるための条件として

$$U(\boldsymbol{k}, \omega(k)) = U^\dagger(-\boldsymbol{k}, -\omega(k)). \qquad (10.4.23)$$

(10.4.21) を (10.4.19) に代入し,両辺を比較することによって,つぎの交換関係が導かれる.

$$\left.\begin{array}{l}[U(\boldsymbol{k}, \omega(k)), U^\dagger(\boldsymbol{k}', \omega(k'))] = 2\omega(k)\delta^3(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \\ [U(\boldsymbol{k}, \omega(k)), U(\boldsymbol{k}', \omega(k'))] = 0\end{array}\right\}. \qquad (10.4.24)$$

いま新たに

$$a(\boldsymbol{k}) \equiv U(\boldsymbol{k}, \omega(k))/\sqrt{2\omega(k)} \qquad (10.4.25)$$

とすると,

$$\phi(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int \frac{d^3\boldsymbol{k}}{\sqrt{2\omega(k)}}\{a(\boldsymbol{k})e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}-\omega x_0)} + a^\dagger(\boldsymbol{k})e^{-i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}-\omega x_0)}\} \qquad (10.4.26)$$

$$\left.\begin{array}{l}[a(\boldsymbol{k}), a^\dagger(\boldsymbol{k}')] = \delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \\ [a(\boldsymbol{k}), a(\boldsymbol{k}')] = 0\end{array}\right\}. \qquad (10.4.27)$$

ここでさらに運動量空間での任意の直交関数系列 $\{f_n(\boldsymbol{k})\}$

$$\int d^3\boldsymbol{k} f_n^*(\boldsymbol{k}) f_m(\boldsymbol{k}) = \delta_{nm} \qquad (10.4.28)$$

を導入し,$a(\boldsymbol{k})$ をつぎのように展開しよう.

$$a(\boldsymbol{k}) = \sum_n c_n f_n(\boldsymbol{k}) \qquad (10.4.29)$$

$$c_n \equiv \int d^3\boldsymbol{k} f_n^*(\boldsymbol{k}) a(\boldsymbol{k}). \qquad (10.4.30)$$

(10.4.27) より,

$$\left.\begin{array}{l}[c_n, c_m^\dagger] = \delta_{nm} \\ [c_n, c_m] = [c_n^\dagger, c_m^\dagger] = 0\end{array}\right\}. \qquad (10.4.31)$$

$c_n, c_n^\dagger$ は,(9.2.19) の型の消滅・生成演算子に他ならない.実際 $a(\boldsymbol{k}), a^\dagger(\boldsymbol{k})$ 自身,運動量 $\boldsymbol{k}$ の粒子の消滅・生成演算子であるが,質点の量子力学で知られるように,運動量の厳密に確定した状態は,規格化不可能で量子力学的状態としては許されない.そこで§10.2 で配位空間に対して行なったように,ここでは3次元運動量空間を微小体積素片に分割し,それらを離散的添字 n で番号づけする.

上の直交関数系列 $f_n(\boldsymbol{k})$ として，素片 n(そこでの平均運動量を $\boldsymbol{k}^{(n)}$ とする)の内部を除いていたる所で零であるような規格化された関数を選べば，(10.4.30)の c_n は，運動量がほとんど $\boldsymbol{k}_n$ の粒子の消滅演算子と見なされる．以後，それを $c(\boldsymbol{k}^{(n)})$ と記述する．

系のエネルギー・運動量 P_μ は，(10.2.40), (10.2.38)より，

$$\left.\begin{aligned} P_i &= \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{x}\left[\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\phi(x)\right)\frac{\partial}{\partial x_0}\phi+\left(\frac{\partial}{\partial x_0}\phi\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_i}\phi\right)\right] \\ P_0 &= \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{x}\left[\left(\frac{\partial}{\partial x_0}\phi\right)^2+(\nabla\phi)^2+\kappa^2\phi^2\right] \end{aligned}\right\}. \tag{10.4.32}$$

これを，生成・消滅演算子で書くと，

$$\begin{aligned} P_i &= \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{k}k_i(a^\dagger(\boldsymbol{k})a(\boldsymbol{k})+a(\boldsymbol{k})a^\dagger(\boldsymbol{k})) \\ &= \frac{1}{2}\sum k_i^{(n)}(c^\dagger(\boldsymbol{k}^{(n)})c(\boldsymbol{k}^{(n)})+c(\boldsymbol{k}^{(n)})c^\dagger(\boldsymbol{k}^{(n)})) \\ &= \sum_n k_i^{(n)}\left(N(\boldsymbol{k}^{(n)})+\frac{1}{2}\right) \end{aligned} \tag{10.4.33}$$

$$\begin{aligned} P_0 &= \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{k}\omega(k)(a^\dagger(\boldsymbol{k})a(\boldsymbol{k})+a(\boldsymbol{k})a^\dagger(\boldsymbol{k})) \\ &= \sum_n \omega(k^{(n)})\left(N(\boldsymbol{k}^{(n)})+\frac{1}{2}\right). \end{aligned} \tag{10.4.34}$$

ここに

$$N(\boldsymbol{k}^{(n)}) \equiv c^\dagger(\boldsymbol{k}^{(n)})c(\boldsymbol{k}^{(n)}) \tag{10.4.35}$$

は，運動量 $\boldsymbol{k}^{(n)}$ の粒子の個数演算子である．P_i, P_0 の最後の表式の $N(\boldsymbol{k}^{(n)})$ に付加される1/2は，$c(\boldsymbol{k}^{(n)})c^\dagger(\boldsymbol{k}^{(n)})$ の積の順序をいれかえて個数演算子にする際に生ずるもので，**真空のゆらぎのエネルギー**をひきおこす．実際，真空状態 $|0\rangle$ を

$$\left.\begin{aligned} &a(\boldsymbol{k})|0\rangle = 0 \\ &\quad(\text{あるいは } c(\boldsymbol{k}^{(n)})|0\rangle=0) \\ &\langle 0|0\rangle = 1 \end{aligned}\right\} \tag{10.4.36}$$

によって定義すると，たしかにそれは P_0 の最低固有状態であるが，その値は**無限大**となる．

$$P_0|0\rangle = \left(\sum_n \omega(k^{(n)})/2\right)|0\rangle. \tag{10.4.37}$$

運動量に対しては，

$$P_i|0\rangle = \left(\sum_n k_i{}^{(n)}/2\right)|0\rangle \tag{10.4.38}$$

となり，その固有値は，一般に不定である．真空のゆらぎのエネルギーは，調和振動子の量子力学ですでによく知っている．実際スカラー場は，上の P_0 の構造から見ると，振動数の異なる**無数の調和振動子の集合**と見なされる．しかし場のもつこの無限の自由度のために，真空のゆらぎも上のような無限大あるいは不定性となって現れる．そこで古典論から量子論に移る際，以下の**正規積**(normal product)の手続きを物理量にほどこすものと仮定する．すなわち正規積は，物理量 O を構成する場の量を，生成・消滅演算子で書き下した後，それらは相互に可換(Bose 統計のとき)，あるいは反可換(Fermi 統計のとき)として，各項においてすべての生成演算子はすべての消滅演算子の左側に位置するよう並べかえて得られる量で，これを $:O:$ と記す．これを P_μ に適用すると，

$$\begin{aligned} P_i &= \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{x} : \left\{\left(\frac{\partial}{\partial x_k}\phi(x)\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_0}\phi\right)+\left(\frac{\partial}{\partial x_0}\phi\right)\left(\frac{\partial}{\partial x_k}\phi\right)\right\} : \\ &= \sum_n k_i{}^{(n)} N(\boldsymbol{k}^{(n)}) \end{aligned} \tag{10.4.33$'$}$$

$$\begin{aligned} P_0 &= \frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{x} : \left\{\left(\frac{\partial}{\partial x_0}\phi\right)^2 + (\nabla\phi)^2 + \kappa^2\phi^2\right\} : \\ &= \sum_n \omega(k^{(n)}) N(\boldsymbol{k}^{(n)}). \end{aligned} \tag{10.4.34$'$}$$

いま特定の $\boldsymbol{k}^{(n)}$ に注目し，それを $\boldsymbol{k}$ と記述する．$N(\boldsymbol{k})$ の固有状態

$$|n(\boldsymbol{k})\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{n(\boldsymbol{k})\,!}} c^\dagger(\boldsymbol{k})^{n(\boldsymbol{k})}|0\rangle \tag{10.4.39}$$

は，P_μ の固有状態でもあり

$$P_\mu|n(\boldsymbol{k})\rangle = (k_\mu \cdot n(\boldsymbol{k}))|n(\boldsymbol{k})\rangle \tag{10.4.40}$$

の固有値をもつ．ここに $k_\mu = (\boldsymbol{k}, i\omega(k))$ である．(10.4.40) から，量子化されたスカラー場の‘量子性’をはっきり読みとることができる．

場の真空期待値　(10.4.26)，(10.4.27) および (10.4.36) から，容易に次の結果を導くことができる．

$$\langle 0|\phi(x)\phi(x')|0\rangle = i\Delta^{(+)}(x-x'). \tag{10.4.41}$$

$\Delta^{(+)}(x)$ は，*(10. 4. 13)* の $\Delta(x)$ 関数の正振動数部分で，その負振動数部分 $\Delta^{(-)}(x)$ とつぎのように関係している.

$$\Delta(x) = \Delta^{(+)}(x) + \Delta^{(-)}(x) \qquad (10.4.42)$$

$$\Delta^{(+)}(x) = -\Delta^{(-)}(-x) = \frac{-i}{(2\pi)^3}\int_{k_0>0} d^4k\delta(k_\sigma{}^2+\kappa^2)e^{ik_\mu x_\mu}$$

$$= \frac{-i}{(2\pi)^3}\int \frac{d^3\boldsymbol{k}}{2\omega(k)}e^{i(\boldsymbol{kx}-\omega(k)x_0)}$$

$$= \frac{-\varepsilon(x_0)}{4\pi}\delta(x_\mu{}^2) - \theta(x_\mu{}^2)\frac{i\kappa}{4\pi^2\sqrt{x_\mu{}^2}}K_1(\kappa\sqrt{x_\mu{}^2})$$

$$+\frac{i\kappa}{8\pi\sqrt{-x_\mu{}^2}}\theta(-x_\mu{}^2)\{N_1(\kappa\sqrt{-x_\mu{}^2}) - i\varepsilon(x_0)J_1(\kappa\sqrt{-x_\mu{}^2})\}. \qquad (10.4.43)$$

(10. 4. 43) の性質から,

$$\langle 0|\{\phi(x), \phi(x')\}|0\rangle = \Delta^{(1)}(x-x'). \qquad (10.4.44)$$

$\Delta^{(1)}(x)$ は，*(10. 4. 14)* で定義された関数で，次式を満たす.

$$\Delta^{(1)}(x) = i(\Delta^{(+)}(x) - \Delta^{(-)}(x)). \qquad (10.4.45)$$

スカラー場の局所性　われわれは §10. 1 で，**非相対論的**な多粒子系の量子力学から導いた第2量子化された場 $\psi(\boldsymbol{x})$ は，空間点 $\boldsymbol{x}$ に局所化された粒子の消滅演算子という性格をもつことを示した．いまの**相対論的**スカラー場も，*(10. 4. 18)* による波の伝播や，*(10. 4. 19)* の交換関係においては，光円錐上に特異性をもつ不変関数 $\Delta(x)$ に規制された，ある意味での局所性をもつことは明らかである．ところでいま

$$|\boldsymbol{x}\rangle \equiv \phi(\boldsymbol{x}, 0)|0\rangle \qquad (10.4.46)$$

なる状態についてみると，それは *(10. 1. 6)* に見られるような直交性

$$\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'\rangle = \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \qquad (10.1.6')$$

をもたず，*(10. 4. 43)* から

$$\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'\rangle = i\Delta^{(+)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}', 0) = \frac{\kappa}{4\pi^2|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}K_1(\kappa|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|) \qquad (10.4.47)$$

となる．ここに $K_1(\kappa r)$ は変形 Bessel 関数で，$r\to\infty$ において $e^{-\kappa r}$ のように指数関数的に減衰する．このように相対論的スカラー場においては，§10. 1, c) で述べたように，*(10. 1. 6)* の直交性を満たす基底ベクトル $|\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N\rangle$ を，場

$\phi(x)$ から局所的につくりだすことは不可能であり，したがって配位空間での確率振幅を相対論的に導入することができない．これについては，Newton-Wigner (1949) のくわしい研究がある．

b) 複素スカラー場

$\phi(x)$ が複素関数の場合も，2つの実数関数 $\phi_1(x), \phi_2(x)$ を用いて，$\phi(x)=(\phi_1(x)+i\phi_2(x))/\sqrt{2}$ とすれば，a) の場合の考察に帰着される．ただ ϕ_1 と ϕ_2 の間の変換の自由度に対応して，新しい物理的内容がもちこまれる．

この場合の Lagrange 密度関数は，

$$
\begin{aligned}
L(x) &= -\left(\frac{\partial\phi^*(x)}{\partial x_\mu}\right)\left(\frac{\partial\phi(x)}{\partial x_\mu}\right)-\kappa^2\phi^*(x)\phi(x) \\
&= \sum_{i=1,2}\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\phi^{(i)}\right)^2-\frac{1}{2}\kappa^2\phi^{(i)2}\right\}.
\end{aligned}
\tag{10.4.48}
$$

正準変数は $\{\phi(x), \phi^*(x)\,;\pi(x)=\partial\phi^*(x)/\partial x_0, \pi^*(x)=\partial\phi(x)/\partial x_0\}$ で，Bose 統計による量子化の結果，a) の議論と同様にして

$$
[\phi(x), \phi^\dagger(x')] = i\Delta(x-x'). \tag{10.4.49}
$$

ここに $\phi^\dagger(x)=(\phi_1-i\phi_2)/\sqrt{2}$ で，量子化された段階では $\phi(x)$ に対して，Hermite 共役の関係になる．(10.4.26) に対応して $\phi, \phi^\dagger$ を Fourier 展開する．

$$
\left.
\begin{aligned}
\phi(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{\sqrt{2\omega(\boldsymbol{k})}}\{a(\boldsymbol{k})e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}-\omega x_0)}+b^\dagger(\boldsymbol{k})e^{-i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}-\omega x_0)}\} \\
\phi^\dagger(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{\sqrt{2\omega(\boldsymbol{k})}}\{b(\boldsymbol{k})e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}-\omega x_0)}+a^\dagger(\boldsymbol{k})e^{-i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}-\omega x_0)}\}
\end{aligned}
\right\}.
\tag{10.4.50}
$$

$a(\boldsymbol{k}), b(\boldsymbol{k})$ は，$\phi^{(1)}, \phi^{(2)}$ のそれと次のように結ばれている．

$$
\left.
\begin{aligned}
a(\boldsymbol{k}) &= (a^{(1)}(\boldsymbol{k})+ia^{(2)}(\boldsymbol{k}))/\sqrt{2} \\
b(\boldsymbol{k}) &= (a^{(1)}(\boldsymbol{k})-ia^{(2)}(\boldsymbol{k}))/\sqrt{2}
\end{aligned}
\right\}.
\tag{10.4.51}
$$

それらの交換関係は，(10.4.49) あるいは (10.4.27) より

$$
\left.
\begin{aligned}
&[a(\boldsymbol{k}), a^\dagger(\boldsymbol{k}')] = \delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \\
&[b(\boldsymbol{k}), b^\dagger(\boldsymbol{k}')] = \delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \\
&\text{その他の交換関係はすべて } 0
\end{aligned}
\right\}
\tag{10.4.52}
$$

となる．

$L(x)$ は $\phi^{(1)}$ と $\phi^{(2)}$ について対称で，つぎのゲージ変換の下での不変性をもつ．

$$\phi(x) \longrightarrow \phi'(x) = e^{-i\alpha}\phi(x) \tag{10. 4. 53}$$

すなわち

$$\left.\begin{aligned} \phi_1 &\longrightarrow \phi_1{}' = \cos\alpha\phi_1 + \sin\alpha\phi_2 \\ \phi_2 &\longrightarrow \phi_2{}' = -\sin\alpha\phi_1 + \cos\alpha\phi_2 \end{aligned}\right\}. \tag{10. 4. 53'}$$

この変換は(*10. 2. 59*)において，$\alpha=\lambda\delta\omega$ とおいたものに対応し，保存する4元カレント $j_\mu(x)$ は，

$$j_\mu(x) = i\lambda : \phi^\dagger(x)\frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial x_\mu}\phi(x) = i\lambda : \phi_1(x)\frac{\overleftrightarrow{\partial}}{\partial x_\mu}\phi_2(x) : \tag{10. 4. 54}$$

全チャージ Q (*10. 2. 62*)は

$$Q = -\lambda\int d^3\boldsymbol{k}\,\{a^\dagger(\boldsymbol{k})a(\boldsymbol{k}) - b^\dagger(\boldsymbol{k})b(\boldsymbol{k})\} \tag{10. 4. 55}$$

またエネルギー・運動量 P_μ は，

$$P_\mu = \int d^3\boldsymbol{k}k_\mu\{a^\dagger(\boldsymbol{k})a(\boldsymbol{k}) + b^\dagger(\boldsymbol{k})b(\boldsymbol{k})\} \tag{10. 4. 56}$$

によって与えられる．以上の結果から，量子化された複素スカラー場は，4元運動量 $k_\mu=(\boldsymbol{k}, i\omega(\boldsymbol{k}))$ をもち，相互に逆符号のチャージをもつ**粒子**と**反粒子**の自由度を含むことがわかる．$a(\boldsymbol{k})$ と $b(\boldsymbol{k})$ はそれぞれの消滅演算子である．

最後に統計について一言する．もし(*10. 4. 49*)で Fermi 型を採用したとすれば，上の Q と P_μ の表現の中で $b^\dagger b$ の項の符号が変わることが容易にわかる．その結果，粒子と反粒子は，共通のチャージをもつことになる反面，反粒子は負エネルギーをもった粒子となる．もちろん負エネルギー粒子の存在を許せば，相互作用の下で系の安定性がくずれ，非物理的情況をひきおこす．

c) Dirac 場

§7. 4 の (*7. 4. 1*) の Dirac 場の方程式(ただし $\gamma_4\equiv\gamma^0$, $\gamma_k\equiv -i\gamma^k$)

$$\left(\gamma_\mu\frac{\partial}{\partial x_\mu} + \kappa\right)\psi(x) = 0 \tag{10. 4. 57}$$

を導く実の Lagrange 密度関数は

$$L = \frac{-1}{2}\left\{\bar{\psi}\gamma_\mu\frac{\partial}{\partial x_\mu}\psi - \left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\bar{\psi}\right)\gamma_\mu\psi\right\} - \kappa\bar{\psi}\psi \tag{10. 4. 58}$$

で与えられる．$\bar{\psi}$ は $\psi^*\gamma_4$ を表すが，ψ が量子化されると $\psi^\dagger\gamma_4$ を意味する．上

の L から，ψ と ψ^* を一般化座標として，一般化運動量を求めると，$\pi=i\psi^*/2$，$\pi^*=-i\psi/2$ となって，正準変数の間の独立性がそこなわれる．そこで §10.1 e) の $\bar{L}$(*10. 1. 57*) に対して議論したように，上の L に $(-1/2)(\partial/\partial x_\mu)(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)$ を付加したものを新たに L とする．

$$L=-\bar{\psi}\left(\gamma_\mu\frac{\partial}{\partial x_\mu}+\kappa\right)\psi. \tag{10.4.59}$$

この場合，正準変数は $\psi(x)$ とそれに共役な

$$\pi(x)=\partial L/\partial\psi_{,0}=i\psi^*(x) \tag{10.4.60}$$

となる．ここで Bose 統計と **Fermi 統計**による量子化の可能性があるが，先に得られる結論を見越してまず Fermi 統計を採用する．

$$\left.\begin{aligned}\{\psi_\alpha(\boldsymbol{x},x_0),\psi_\beta{}^\dagger(\boldsymbol{x}',x_0)\}&=\delta_{\alpha\beta}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\\ \{\psi_\alpha(\boldsymbol{x},x_0),\psi_\beta(\boldsymbol{x}',x_0)\}&=0\end{aligned}\right\}. \tag{10.4.61}$$

(*10. 4. 57*) の波動方程式の初期値問題は，スカラー場の場合と同様な考察によって，次式で与えられることがわかる．

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{x},x_0)&=\int_{\sigma'}d\sigma_\mu{}'\left(\gamma_\sigma\frac{\partial}{\partial x_\sigma}-\kappa\right)\Delta(x-x')\gamma_\mu\psi(x')\\ &=-i\int d^3\boldsymbol{x}'\left(\gamma_\sigma\frac{\partial}{\partial x_\sigma}-\kappa\right)\Delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',x_0-x_0{}')\gamma_4\psi(\boldsymbol{x}',x_0{}').\end{aligned} \tag{10.4.62}$$

(*10. 4. 61*) と (*10. 4. 62*) を組み合わせて，任意の時刻における場の交換関係

$$\left.\begin{aligned}\{\psi_\alpha(x),\bar{\psi}_\beta(x')\}&=-iS_{\alpha\beta}(x-x')\\ \{\psi_\alpha(x),\psi_\beta(x')\}&=0\end{aligned}\right\} \tag{10.4.63}$$

が得られる．ただし

$$S_{\alpha\beta}(x)\equiv\left(\gamma_\mu\frac{\partial}{\partial x_\mu}-\kappa\right)_{\alpha\beta}\Delta(x). \tag{10.4.64}$$

(*10. 4. 63*) の結果は，ψ と $\bar{\psi}$ は相互に空間的な位置においても可換でないことを示す．しかし ψ と $\bar{\psi}$ の偶数個の積からなる量は，(*10. 3. 19*) の恒等式を用いることによって，空間的領域で可換であることが容易に示せる．したがってオブザーバブルとしてこのような構造をもつものに限れば，Bose 統計の場合と同様に，観測の影響が光速以上で伝わる危険性を排除することができる．

つぎに §7.4 c) の考察にならって，(*10. 4. 57*) の一般解 $\psi_\alpha(x)$ を，つぎのよう

に Fourier 展開する.

$$\psi_\alpha(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d^3\boldsymbol{k}\sum_{r=1,2}\{a_r(\boldsymbol{k})u_\alpha{}^r(\boldsymbol{k})e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega x_0)}+b_r(\boldsymbol{k})v_\alpha{}^r(\boldsymbol{k})e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega x_0)}\} \tag{10.4.65}$$

ここに u, v は

$$\left.\begin{aligned} &(i\gamma_\mu k_\mu+\kappa)u^r(\boldsymbol{k}) = 0 \\ &(i\gamma_\mu k_\mu-\kappa)u^r(\boldsymbol{k}) = 0 \\ &(k_\mu\equiv(\boldsymbol{k}, i\omega)) \end{aligned}\right\} \tag{10.4.66}$$

を満たす(*10. 4. 57*)の正•負エネルギー固有解で，両者はつぎの**粒子・反粒子変換**(あるいは荷電共役変換) C によって結ばれている.

$$u^r(\boldsymbol{k}) = C\bar{v}^r(\boldsymbol{k}). \tag{10.4.67}$$

C は

$$C\gamma_\mu{}^{\mathrm{T}}C^{-1} = -\gamma_\mu, \qquad C^{\mathrm{T}} = -C \tag{10.4.68}$$ †

を満たす4行4列のユニタリー行列である．また $r=1, 2$ は§7.4 c) で述べた**ヘリシティ**状態を表す．すなわち,

$$\left.\begin{aligned} &\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}}{k}u^r(\boldsymbol{k}) = \epsilon_r v^r(\boldsymbol{k}) \\ &\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}}{k}v^r(\boldsymbol{k}) = -\epsilon_r v^r(\boldsymbol{k}) \end{aligned}\right\} \tag{10.4.69}$$

$$(\epsilon_r = \pm 1).$$

こうして(*10. 4. 63*)に，上の(*10. 4. 65*)の表現を代入し，両辺を比較することによって，つぎの交換関係を得る.

$$\left.\begin{aligned} &\{a_r(\boldsymbol{k}), a_{r'}{}^\dagger(\boldsymbol{k}')\} = \delta_{rr'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \\ &\{b_r(\boldsymbol{k}), b_{r'}{}^\dagger(\boldsymbol{k}')\} = \delta_{rr'}\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \end{aligned}\right\}. \tag{10.4.70}$$

この際，u, v の満たすつぎの関係式を用いた.

$$\left.\begin{aligned} &\sum_r u_\alpha{}^r(\boldsymbol{k})\bar{u}_\beta{}^r(\boldsymbol{k}) = (-i\gamma_\mu k_\mu+\kappa)_{\alpha\beta}/2\omega(k) \\ &\sum_r v_\alpha{}^r(\boldsymbol{k})\bar{v}_\beta{}^r(\boldsymbol{k}) = -(i\gamma_\mu k_\mu+\kappa)_{\alpha\beta}/2\omega(k) \end{aligned}\right\}. \tag{10.4.71}$$

(*10. 4. 58*)の L は $\psi\to\psi'=e^{-i\alpha}\psi$ のゲージ変換の下で不変で，それに伴い次の4元保存カレント $j_\mu(x)$ を得る.

---

† T は転置行列を意味する.

$$j_\mu(x) = -i\lambda : \bar{\psi}(x)\gamma_\mu\psi(x) :. \qquad (10.4.72)$$

全チャージ Q (*10.2.62*) は

$$Q = -\lambda\int d^3\boldsymbol{k} \sum_{1,2} \{a_r{}^\dagger(\boldsymbol{k})a_r(\boldsymbol{k}) - b_r{}^\dagger(\boldsymbol{k})b_r(\boldsymbol{k})\}, \qquad (10.4.73)$$

また系のエネルギー・運動量 P_μ は

$$P_i = \int d^3\boldsymbol{x} : \psi^\dagger(x)\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_i}\psi(x) :, \qquad P_0 = \int d^3\boldsymbol{x} : \psi^\dagger(\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + \kappa\beta)\psi : \qquad (10.4.74)$$

$$P_\mu = \int d^3\boldsymbol{k} k_\mu \sum_{1,2} \{a_r{}^\dagger(\boldsymbol{k})a_r(\boldsymbol{k}) + b_r{}^\dagger(\boldsymbol{k})b_r(\boldsymbol{k})\}. \qquad (10.4.75)$$

上の結果は，Fermi 統計の仮定に従って導かれたが，もし (*10.4.63*) で Bose 統計を採用したとすると，Q と P_μ の表現の中で反粒子に対応する $b_r{}^\dagger b_r$ の項の符号が逆転し，スカラー場に対して Fermi 統計を採用したのと同様な非物理的な結果をもたらすことがわかる．こうしてスピン 1/2 の Dirac 場は Fermi 統計に従うことが結論される．

最後に 4 次元角運動量 $M_{\mu\nu}$ について見よう．

$$M_{\mu\nu} = \int d^3\boldsymbol{x} : \psi^\dagger(x)\left(x_\mu\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_\nu} - x_\nu\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x_\mu}\right)\psi(x) : + \int d^3\boldsymbol{x} : \psi^\dagger(x)\frac{1}{4i}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu)\psi(x) :. \qquad (10.4.76)$$

これより，その空間成分 $\boldsymbol{J} = (M_{23}, M_{31}, M_{12})$ は，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J} &= \int d^3\boldsymbol{x} : \psi^\dagger(x)\left(\boldsymbol{x}\times\frac{1}{i}\nabla + \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}\right)\psi(x) : \\ &= \int d^3\boldsymbol{k}\left\{\sum_r a_r{}^\dagger(\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}\times\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}a_r(\boldsymbol{k}) + \sum_r b_r{}^\dagger(\boldsymbol{k})\boldsymbol{k}\times\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}b_r(\boldsymbol{k})\right\} \\ &\quad + \int d^3\boldsymbol{k}\sum_{r,s}\left\{a_r{}^\dagger(\boldsymbol{k})a_s(\boldsymbol{k})u_r{}^*(\boldsymbol{k})\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}u_s(\boldsymbol{k}) - b_r{}^\dagger(\boldsymbol{k})b_s(\boldsymbol{k})v_s{}^*(\boldsymbol{k})\frac{\boldsymbol{\sigma}}{2}v_r(\boldsymbol{k})\right\}.\end{aligned} \qquad (10.4.77)$$

ここで $\boldsymbol{J}$ の運動量方向の成分 Γ を考えると，最後の式の第 1 項の軌道角運動量部分は落ち，スピン角運動量の運動量方向成分——**ヘリシティ**部分——がとりだされる．実際，(*10.4.69*) を用いてつぎの結果を得る．

$$\Gamma = \int d^3k \sum_{rs} \left\{ a_r^\dagger(\boldsymbol{k}) a_s(\boldsymbol{k}) u_r^*(\boldsymbol{k}) \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}}{2k} u_s(\boldsymbol{k}) - b_r^\dagger(\boldsymbol{k}) b_s(\boldsymbol{k}) v_s^*(\boldsymbol{k}) \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{k}}{2k} v_r(\boldsymbol{k}) \right\}$$

$$= \int d^3k \sum_r \left\{ \frac{\epsilon_r}{2} a_r^\dagger(\boldsymbol{k}) a_r(\boldsymbol{k}) + \frac{\epsilon_r}{2} b_r^\dagger(\boldsymbol{k}) b_r(\boldsymbol{k}) \right\}. \tag{10.4.78}$$

§10.5　反転不変性およびスピンと統計の関係

a)　空間反転，粒子-反粒子変換

Klein-Gordon 方程式および Dirac 方程式が，空間反転 (P) および粒子-反粒子変換 (C) (荷電共役変換ともいう) の下で不変であることはよく知られている．その際，場の量は，つぎのように変換される．

$$\left.\begin{array}{lll} P:\ \text{スカラー場} & \phi(x) \longrightarrow \phi'(x') = \eta_P \phi(x) \\ \quad\ \ \text{Dirac 場} & \psi(x) \longrightarrow \psi'(x') = \eta_P \gamma_4 \psi(x) \end{array}\right\} \tag{10.5.1}$$
$$(\boldsymbol{x}' = -\boldsymbol{x},\ \ x_0' = x_0).$$

η_P は，$|\eta_P|=1$ の定数因子で，各種の場の間に相互作用があるとき，パリティ (たとえばスカラー場 ($\eta_P=1$)，擬スカラー場 ($\eta_P=-1$) の区別) として物理的意味をもつことになる．

$$\left.\begin{array}{lll} C:\ \text{スカラー場} & \phi(x) \longrightarrow \phi'(x) = \eta_C \phi^\dagger(x) \\ \quad\ \ \text{Dirac 場} & \psi(x) \longrightarrow \psi'(x) = \eta_C C\bar{\psi} \, (\equiv \eta_C \psi^C) \end{array}\right\}. \tag{10.5.2}$$ †

η_C はやはり $|\eta_C|=1$ の定数因子である．上の場の変換は，さきの連続変換の場合のように，ユニタリー演算子 $\boldsymbol{P}, \boldsymbol{C}$ によって，ユニタリー変換として遂行される．

$$\left.\begin{array}{l} P:\ \boldsymbol{P}\phi(\boldsymbol{x}, x_0)\boldsymbol{P}^{-1} = \phi'(\boldsymbol{x}, x_0) = \eta_P \phi(-\boldsymbol{x}, x_0) \\ \quad\ \ \boldsymbol{P}\psi(\boldsymbol{x}, x_0)\boldsymbol{P}^{-1} = \psi'(\boldsymbol{x}, x_0) = \eta_P \gamma_4 \psi(-\boldsymbol{x}, x_0) \end{array}\right\}, \tag{10.5.3}$$

$$\left.\begin{array}{l} C:\ \boldsymbol{C}\phi(x)\boldsymbol{C}^{-1} = \eta_C \phi^\dagger(x) \\ \quad\ \ \boldsymbol{C}\psi(x)\boldsymbol{C}^{-1} = \eta_C C\bar{\psi}(x) \end{array}\right\}. \tag{10.5.4}$$

C 変換は，消滅演算子の a と b のいれかえ (粒子-反粒子変換) をひきおこし，(*10.4.55*)，(*10.4.56*)，(*10.4.73*)，(*10.4.75*) からわかるように

$$\left.\begin{array}{l} \boldsymbol{C}Q\boldsymbol{C}^{-1} = -Q \\ \boldsymbol{C}P_\mu \boldsymbol{C}^{-1} = P_\mu \end{array}\right\} \tag{10.5.5}$$

である．しかしこれまでに定めたスピンと統計の関係 (スピン 0 のスカラー場に

---

† 式中の C は，(*10.4.68*) で定義されている．

対して Bose 統計，スピン 1/2 の Dirac 粒子に対して Fermi 統計) を逆転させるならば，すでに述べたように P_μ, Q の表式の中で反粒子に対応する $b^\dagger b$ の項の符号が逆転し，それに伴って，上の (10.5.5) の変換も，符号を逆転する．したがって実際には**粒子-反粒子変換**の下での (10.5.5) の変換性の要請によって，より**一般的なスピンと統計の関係** (整数スピンの場に対して Bose 統計，半整数スピンの場に対して Fermi 統計) を定めることができる．

b) 時間反転

時間反転 T と前述の P, C 変換の最も大きな違いは，量子力学的な取扱いにおいては，T 変換はユニタリー変換の枠組の中におさまらない点である．それを見るため，一般に Schrödinger 方程式

$$-\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = H(t)\,\Psi(t) \tag{10.5.6}$$

の T 変換が，ユニタリー変換 U で遂行されるとしよう．(10.5.6) が T 変換の下で不変であるということは，'フィルムの逆転' といわれるように，いま $\Psi(t)$ が (10.5.6) の解であるとき，$\Psi'(t) = U\Psi(-t)$ もその解であるよう U が定められることを意味する．実際 U に対して次の条件が課せられる．

$$UH(t)\,U^{-1} = -H(-t). \tag{10.5.7}$$

このときは，ある任意の状態 Ψ_a と，その**時間反転状態** $\psi_{\underline{a}} \equiv U\psi_a$ の間に

$$(\Psi_a, H(t)\,\Psi_a) = -(\Psi_{\underline{a}}, H(-t)\,\Psi_{\underline{a}}) \tag{10.5.8}$$

の関係が成立し，一般に**エネルギーの正値性**を損なう状態を許すことになる．

そこで T 変換は，複素共役の演算を含む反ユニタリー変換 (anti-unitary transformation)

$$\Psi_{\underline{a}} = \boldsymbol{T}\Psi_a = U\Psi_a{}^* \tag{10.5.9}$$

で遂行されるものとしよう．U はユニタリー演算子である．この場合は，(10.5.6) の不変性の条件は，$\Psi(t)$ が (10.5.6) の解であるとき，$\Psi'(t) \equiv \boldsymbol{T}\Psi(-t) = U\Psi^*(-t)$ がやはりその解であることである．それは次式によって保証される．

$$\boldsymbol{T}H(-t)\,\boldsymbol{T}^{-1} = UH^*(-t)\,U^{-1} = H(t) \tag{10.5.10}$$

(H^* は H の複素共役演算子)．

さて $\boldsymbol{T}$ の反ユニタリー性について，たとえばつぎのような運算が成り立つことに注意しよう．O を任意の演算子として，

$$(\Psi_a, O\Psi_b) = (\Psi_a, T^{-1}TO\Psi_b) = (T\Psi_a, TO\Psi_b)^*$$
$$= (\Psi_{\underset{\sim}{a}}, TOT^{-1}\Psi_{\underset{\sim}{b}})^* = (\Psi_{\underset{\sim}{b}}, UO^{\mathrm{T}}U^{-1}\Psi_{\underset{\sim}{a}}) \qquad (10.5.11)$$
(O^{T} は O の転置演算子).

自由場のハミルトニアンが(10.5.10)を満たすためには，場に対して次の変換をほどこせばよいことがわかる．それには，実際2種類の変換があって，

$$\left.\begin{array}{ll} T\phi(\boldsymbol{x}, x_0)T^{-1} = \eta_T\phi(\boldsymbol{x}, -x_0) & \text{あるいは} \quad \eta_T\phi^\dagger(\boldsymbol{x}, -x_0) \\ T\psi(\boldsymbol{x}, x_0)T^{-1} = \eta_T\psi^{c\dagger}(\boldsymbol{x}, -x_0)\gamma_5\gamma_4 & \text{あるいは} \quad \eta_T\psi^\dagger(\boldsymbol{x}, -x_0)\gamma_5\gamma_4 \end{array}\right\}. \qquad (10.5.12)$$

前者を Wigner 型，後者を Pauli 型と呼ぶ．両者は粒子-反粒子変換によって結ばれており，Pauli 型の T 変換は粒子-反粒子のいれかえを伴っている．

c) *CPT* 変換

上の T 変換の性質をしらべるかわりに，ここで強反転(strong reflection) S と呼ばれる積変換 CPT を考えよう．ただし T は，Wigner 型を意味する．したがって S は時空間の反転と粒子-反粒子のいれかえをもたらす．

まず Dirac 場について見ると，これまでの C, P, T 変換を積み重ねて

$$S\psi(x)S^{-1} = \eta\psi^\dagger(-x)\gamma_5. \qquad (10.5.13)$$

ここで2種の Dirac 場 ψ_a と ψ_b から作られる各種のテンソル

$$t_A{}^{ab}(x) \equiv \bar{\psi}_a(x)\Gamma_A\psi_b(x) \qquad (10.5.14)$$

の変換性を見よう．ここに Γ_A は，

$$\Gamma_A = \left(1,\ \gamma_5,\ \gamma_\mu,\ i\gamma_\mu\gamma_5,\ \sigma_{\mu\nu} = \frac{1}{2i}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu),\ \gamma_5\sigma_{\mu\nu}\right) \qquad (10.5.15)$$

で，t_A は P 変換の下でそれぞれスカラー，擬スカラー，ベクトル，擬ベクトル，テンソル，擬テンソルの変換性をもつ．C 変換の下では，

$$Ct_A{}^{ab}(x)C^{-1} = \epsilon_A t_A{}^{ba}(x). \qquad (10.5.16)$$

ここに ϵ_A は，ベクトル，テンソルの場合 -1，その他では $+1$ である．また(10.5.13)で $\eta_a = \eta_b = 1$ に選ぶと，

$$St_A{}^{ab}(x)S^{-1} = (\gamma_5\psi_a(-x))(\gamma_4\Gamma_A)^*(\psi_b{}^\dagger(-x)\gamma_5)$$
$$= -\psi_b{}^\dagger(-x)\gamma_5(\gamma_4\Gamma_A)^\dagger\gamma_5\psi_a(-x) = \zeta_A(t_A{}^{ab}(-x))^\dagger. \qquad (10.5.17)$$

ただし $\gamma_5\Gamma_A\gamma_5 = \zeta_A\Gamma_A$ で，ζ_A はベクトル，擬ベクトルの場合 -1，その他ではすべて $+1$ である．ところで(10.5.16)，(10.5.17)のいずれにおいても，ψ_a, ψ_b

の間の**反可換性**を用いている．もしそこで逆に**可換性**を仮定すれば ϵ_A, ζ_A の符号は逆転し，その結果，Dirac 場の Lagrange 密度関数(*10. 4. 59*)は，C, S 変換の下で符号を変えることになる．

上の(*10. 5. 16*), (*10. 5. 17*)の導出の過程で，ψ_a と ψ_b の順序をいれかえるとき，$a=b$ の場合に生ずる δ 関数を含む付加項の困難をさけるためには，$t_A{}^{ab}$ を

$$t_A{}^{ab}(x) = \frac{1}{2}\{\bar{\psi}_a(x)\Gamma_A\psi_b(x) - \psi_b(x)\Gamma_A{}^{\mathrm{T}}\bar{\psi}_a(x)\} \quad (10.5.18)$$

のように反対称化をしておけばよい．このときは ψ_a, ψ_b の可換，反可換の性質とは関係なく，(*10. 5. 16*), (*10. 5. 17*)が導かれる．ただ反可換性の仮定は，$t_A{}^{ab}(x)$ が無意味な定数とならないために必要となる．

一方スピンが整数の場について見ると，P, C, T, S の変換の下で，上の $t_A(x)$ あるいはそれの積と同型の変換をする各種のテンソル，擬テンソルが存在する．その際(*10. 5. 17*)の S 変換の最も特徴的な点として，その変換性(ζ_A の値)は，**テンソルの階数**にのみ依存して，空間反転のパリティの差——たとえばスカラーと擬スカラー，ベクトルと擬ベクトルの差——には依存しないことに留意する必要がある．この性質の故に，簡単な考察から，つぎのいわゆる ***CPT* 定理**が導かれる．すなわち，これまでに述べたスピンと統計の関係を満足する場で局所的に構成された相互作用ハミルトニアンが，エルミートで，かつ(反転を含まない)固有ローレンツ変換(proper Lorentz transformation)の下で不変であれば，理論は CPT 変換(S 変換)の下で不変である．上の3つの条件は，現在の局所場の理論を認める限り，ほとんどの相互作用が満たさざるをえないゆるい条件と考えられる．こうしてもし CPT 定理が成り立つとすれば，例えば弱い相互作用において P, C のみでなく CP 不変性も破れている場合，それは時間反転(T 変換)の不変性の破れという重要な結果をもたらすことになる．(CP の破れについては，本講座第11巻『素粒子論』§9.3参照．)

d) パラ統計について

われわれは§10.2で Jordan の議論を通じて，正準量子化の種々の可能性を知った．ここではそれとはやや異なる，いわゆる**パラ統計**の理論にふれておく．それは量子化の原理を，正準変数の交換関係の形に直接求めずに，Heisenberg の運動方程式(*10. 3. 18*)の成立に求める立場である．その際ハミルトニアン $\bar{H}$ の形

が特に重要になるが，ここでは正規積の手続きをとらず，スピン0の場に対しては，(*10. 4. 34*)に立ち戻って，次式をとる．

$$P_0=\frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{k}\omega(\boldsymbol{k})(a^\dagger(\boldsymbol{k})a(\boldsymbol{k})+a(\boldsymbol{k})a^\dagger(\boldsymbol{k})). \qquad (10.5.19)$$

一方スピン1/2の場については，(*10. 4. 74*)の P_0 正規積をとりさり，かわって(*10. 5. 18*)の反対称化の手続きをほどこす．

$$P_0=\frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{k}\sum_r\{a_r^\dagger(\boldsymbol{k})a_r(\boldsymbol{k})-a_r(\boldsymbol{k})a_r^\dagger(\boldsymbol{k})+b_r^\dagger(\boldsymbol{k})b_r(\boldsymbol{k})-b_r(\boldsymbol{k})b_r(\boldsymbol{k})\}. \qquad (10.5.19')$$

以後スピン成分 r，反粒子の自由度 (b_r) の存在は本質的でないので，それを省略し，かつ(*10. 4. 30*)の離散的な生成・消滅演算子($c(\boldsymbol{k}^{(n)})\equiv c_n$ など)を用いると，(*10. 5. 19*)，(*10. 5. 19′*)は特徴的につぎのように書かれる．

$$P_0=\frac{1}{2}\sum_n\omega_n(c_n^\dagger c_n\pm c_nc_n^\dagger). \qquad (10.5.20)$$

右辺の ± は，それぞれスピン0および1/2の場合(あるいはより一般に整数スピンおよび半整数スピンの場合)に対応する．

自由場に対して，Heisenbergの方程式が成り立つためには，つぎの関係式

$$[c_r,\ (c_s^\dagger c_t\pm c_tc_s^\dagger)]=2\delta_{rs}c_t \qquad (10.5.21)$$

が保証されていればよい．上式はしかし量子化条件としては非常に広い可能性を含んでいる．実際，これに対してさらに

$$[c_r,\ (c_sc_t\pm c_tc_s)]=0 \qquad (10.5.22)$$

の条件を付加しても，それらは通常のBose，あるいはFermi統計の交換関係

$$\left.\begin{aligned}c_rc_s\mp c_sc_r&=0\\ c_rc_s^\dagger\mp c_s^\dagger c_r&=0\end{aligned}\right\} \qquad (10.5.23)$$

によって自動的に保証されるが，そのほかにも無数の解をもつ．

Greenは(*10. 5. 21*)，(*10. 5. 22*)の交換関係を実現するつぎのような表現

$$c_r=\sum_{i=1}^{k}c_r^{(i)} \qquad (10.5.24)$$

を見出した．ここに k は，パラ・オーダー(para-order)と呼ばれる量で任意の**整数値**が許される．ここに導入された，いわゆるGreen成分 $c_r^{(i)}$, $c_r^{(i)\dagger}$ は次の交換関係を満たすものと仮定する．

$$\left.\begin{aligned} c_r^{(i)}c_s^{(i)} \mp c_s^{(i)}c_r^{(i)} &= 0 \\ c_r^{(i)}c_s^{(i)} \mp c_s^{(i)\dagger}c_r^{(i)} &= \delta_{sr} \end{aligned}\right\} \qquad (10.5.25)$$

$$c_r^{(i)}c_s^{(j)} \pm c_s^{(j)}c_r^{(i)} = c_r^{(i)}c_s^{(j)\dagger} \pm c_s^{(j)\dagger}c_r^{(i)} = 0 \quad (i \neq j). \qquad (10.5.26)$$

すなわち同一成分の $c_r^{(i)}$, $c_s^{(j)\dagger}$ は，これまでの Bose および Fermi 統計の交換関係をみたすが，異なる成分間においては，Bose と Fermi の関係を逆転している．(*10.5.25*), (*10.5.26*) の下で (*10.5.21*), (*10.5.22*) が保証されることは容易に確かめられる．ここでさらに真空条件として

$$\left.\begin{aligned} c_i|0\rangle &= 0 \\ c_ic_j^\dagger|0\rangle &= k\delta_{ij}|0\rangle \end{aligned}\right\} \qquad (10.5.27)$$

を採用する．こうして $|0\rangle$ につぎつぎに生成演算子を乗じて作られる Hilbert 空間の構造を調べると，オーダー k によって特徴づけられる新しい統計の下では，与えられた状態に共存する粒子は，k 個のグループに分類され，同一のグループに属する粒子は相互に対称(パラ・ボーズの場合)あるいは反対称(パラ・フェルミの場合)状態をとることが結論される．その結果，パラ・ボーズ粒子(パラ・フェルミ粒子)について，完全反対称状態(完全対称状態)が許されるのは，k 個までである．またパラ・フェルミ粒子の場合，同一固有状態に属する粒子は，各グループに高々 1 個しかはいれないが，全体としては k 個まで共存できることになる．パラ・ボーズ粒子の場合は，このような制限はない．もちろん従来の Bose, Fermi 統計は $k=1$ の場合に対応する．

以上が Green によって指摘された従来の統計とは異質のパラ統計の理論の概略であるが，ここではこれ以上の詳細には立ちいらない．(同種の考えが岡山によって提起された．本講座第 10 巻『素粒子論』§8.7, §11.1 参照.)

§10.6　多時間理論から超多時間理論へ

§10.4 で考察した自由場の Lagrange 密度関数に，相互作用項を付け加えて，相対論的な場の方程式を見い出すことは困難ではない．実際，Hamilton 形式による量子化の過程では，‘同時刻’における正準変数としての場の量やその時間微分の導入という点で，相対論的な共変性を形の上では破っているが，その内容自体は相対論的に不変である．たとえば上述の Heisenberg 方程式としての場の波動方程式は L が (*10.2.55*) を満たしていれば Lorentz 変換の下で共変的な形を

備えている．またこの Heisenberg 描像における状態ベクトルの時間的変化はない．しかし§10.4で扱った自由場を除いては，非線形な相互作用項をもつ場の方程式の解を得ることは一般にはむつかしい．そこでつぎに Schrödinger 描像での事情を考えよう．ここではオブザーバブルを構成する場の量は時間的変化がなく，系の変化は状態ベクトルの時間変化におしこめられる．したがって場の量 $u_B(\boldsymbol{x}, x_0)$ の空間と時間変数への依存は明らかに非対称的であり，また状態ベクトルの従う Schrödinger 方程式においても時間が特別な役割をしている．この意味で相対論的形式という点からみて，きわめて不満足である．そこで考えられるのが以下で考察する相対論的**相互作用描像**の理論である．これは Heisenberg 描像と Schrödinger 描像の中間にたつもので，相対論的形式をもつと同時に摂動論的な解を得るのに適切な構造を備えている．この節では，はじめに輻射場の下におかれた相対論的電子の多体系についての Dirac の**多時間理論**についてのべ，それに基づいて朝永・Schwinger の**場の超多時間理論**に簡単にふれる．

a) 相対論的電子多体系の多時間理論

いま輻射場との相互作用下にある n 個の電子多体系を考える．この全体系の Schrödinger 方程式は

$$\left(\bar{H}-i\frac{\partial}{\partial T}\right)\Psi(T) = 0. \qquad (10.6.1)$$

ハミルトニアン $\bar{H}$ は，つぎの諸項よりなる．

$$\bar{H} = \bar{H}_a+\bar{H}_b+V. \qquad (10.6.2)$$

$\bar{H}_a$ は，n 個の電子系のハミルトニアンで

$$\bar{H}_a = \sum_{s=1}^{n}(\boldsymbol{\alpha}^s\cdot\boldsymbol{p}^s+\kappa\beta^s) \equiv \sum_{s=1}^{n} H_s. \qquad (10.6.3)$$

$(\boldsymbol{\alpha}^s, \beta^s)$ は s 番目の電子の Dirac の4行4列行列で $\boldsymbol{\alpha}^s=i\gamma_4{}^{(s)}\boldsymbol{\gamma}^{(s)}$，$\beta^s=\gamma_4{}^{(s)}$ とも書ける．$\boldsymbol{p}^s$ はその運動量，κ は質量である．$\bar{H}_b$ は輻射場のハミルトニアン，V は電子と輻射場の相互作用を記述する．

$$V = \varepsilon\sum_{s=1}^{n} V_s = \varepsilon\sum_{s=1}^{n}(A_0(\boldsymbol{x}^s)-\boldsymbol{\alpha}^s\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^s)). \qquad (10.6.4)$$

ここに $A_\mu(\boldsymbol{x})$ は輻射場を記述するベクトル・ポテンシャル，$\boldsymbol{x}^s$ は s 番目の電子の位置座標，ε は電子の電荷を表す．

さていまの Schrödinger 描像においては，場 $A_\mu(\boldsymbol{x})$ には時間依存がなく，また Schrödinger 方程式(*10.6.1*)においては，時間 T が特別扱いされており，相対論的形式からはほど遠い．そこでまずつぎのユニタリー変換を系にほどこす．

$$\tilde{\Psi}(T)=e^{i\bar{H}_bT}\Psi(T). \tag{10.6.5}$$

$\bar{H}_b$ は電子系のオブザーバブル $\boldsymbol{\alpha}^s, \beta^s, \boldsymbol{x}^s, \boldsymbol{p}^s$ とは可換であるが，$A_\mu(\boldsymbol{x})$ は

$$\tilde{A}_\mu(\boldsymbol{x}, T)\equiv e^{i\bar{H}_bT}A_\mu(\boldsymbol{x})e^{-i\bar{H}_bT} \tag{10.6.6}$$

に移り，$\tilde{A}_\mu(\boldsymbol{x}, x_0)$ (以後 $\tilde{A}_\mu(x)$ とも書く)は次項に述べる相互作用のない自由な輻射場の方程式に従う．一方(*10.6.1*)の Schrödinger 方程式からは H_b の項が落ちて

$$\left\{\sum_{s=1}^{n}(H_s+\tilde{V}_s)-i\frac{\partial}{\partial T}\right\}\tilde{\Psi}(\boldsymbol{x}^1, \boldsymbol{x}^2, \cdots, \boldsymbol{x}^n, F; T)=0 \tag{10.6.7}$$

ただし

$$\tilde{V}_s=\varepsilon\{\tilde{A}_0(\boldsymbol{x}^s, T)-\boldsymbol{\alpha}^s\cdot\tilde{A}(\boldsymbol{x}^s, T)\}. \tag{10.6.8}$$

状態関数 $\tilde{\Psi}(\boldsymbol{x}^1, \boldsymbol{x}^2, \cdots, \boldsymbol{x}^n, F; T)$ は，輻射場への依存 F のほかに，n 個の電子の位置座標 $\{\boldsymbol{x}^s\}$ と**共通時間** T に依存している．すなわちこの Schrödinger 方程式が非相対論的な構造をもつ最大の原因は，相異なる位置座標 $\boldsymbol{x}^s$ をもつ n 個の電子が，共通の時間 T にしばられていることにある．そこでつぎのような可能性を追究する．すなわち状態関数は，$\Psi(\{\boldsymbol{x}^s, t^s\}, F)$ のように，n 個の電子の位置座標 $\boldsymbol{x}^s$ とともに，個別の時間 t^s $(=x_0{}^s)$ に依存すると考え，たまたま n 個の時間 $\{t^s\}$ が共通時間 T にそろったとき，これまでの $\tilde{\Psi}$ に一致することを要請する．このような可能性は，実際 $\tilde{\Psi}(\{\boldsymbol{x}^s, t^s\}, F)$ に，つぎの n 個の方程式を課すことによって実現されることが，容易にたしかめられる．

$$\left(R^s-i\frac{\partial}{\partial t^s}\right)\tilde{\Psi}(\{\boldsymbol{x}^s, t^s\}, F)=0 \qquad (s=1, 2, \cdots, n) \tag{10.6.9}$$

ここに

$$R^s\equiv\boldsymbol{\alpha}^s\cdot\boldsymbol{p}^s+\kappa\beta^s+\varepsilon\{A_0(\boldsymbol{x}^s, t^s)-\boldsymbol{\alpha}^s\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}^s, t^s)\}. \tag{10.6.10}$$

(*10.6.9*)は，またつぎのように完全に相対論的に共変な形に書きかえられる．

$$\left\{\gamma_\mu{}^s\frac{\partial}{\partial x_\mu{}^s}+\kappa-i\varepsilon\gamma_\mu{}^s\tilde{A}_\mu(x^s)\right\}\tilde{\Psi}=0 \qquad (s=1, 2, \cdots, n). \tag{10.6.11}$$

これが多時間理論の基礎方程式である．

b)　輻射場の量子化と付加条件

上の方程式の中の輻射場のベクトル・ポテンシャル $\tilde{A}_\mu(x)$ は，さきに述べたように，相互作用のない自由場の方程式に従う．しかしよく知られているように，輻射場の量子論には複雑な事情がつきまとう．実際，輻射場の記述に際して，場の強さ $F_{\mu\nu}(x)=(\boldsymbol{E}(x),\boldsymbol{H}(x))$ を直接つかえば，この複雑さはない．しかし荷電粒子との相互作用を相対論的に記述しようとすれば，(*10.6.11*)に見るように，ベクトル・ポテンシャル $A_\mu(x)$ の仲立ちが必要となり，これから A_μ の**ゲージ変換**とか**Lorentz 条件**とかの問題が発生してくる．またそれに伴って定式化にも種々の方法が現れる．

$F_{\mu\nu}(x)$ は，A_μ を通じて

$$F_{\mu\nu}(x)=\frac{\partial}{\partial x_\mu}A_\nu(x)-\frac{\partial}{\partial x_\nu}A_\mu(x) \tag{10.6.12}$$

のように定義され，$F_{\mu\nu}$ の従う Maxwell 方程式

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}F_{\mu\nu}=0 \tag{10.6.13}$$

から，$A_\mu(x)$ に対してつぎの波動方程式が課せられる．

$$\Box A_\mu(x)-\frac{\partial}{\partial x_\mu}\frac{\partial}{\partial x_\nu}A_\nu(x)=0. \tag{10.6.14}$$

上の式を Euler 方程式として導く Lagrange 密度関数は，

$$L(x)=-\frac{1}{4}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}A_\nu-\frac{\partial}{\partial x_\nu}A_\mu\right)^2. \tag{10.6.15}$$

この L は，$A_0(x)$ の時間微分を含まないので，量子論に移る際，$A_0(x)$ に正準共役な場は0となって，これまでたびたびふれた拘束条件のある場合の量子化に従わなければならない(第11章)．そこでここでは(*10.6.12*)の $F_{\mu\nu}$ の定義式での A_μ に残された不定性

$$A_\mu(x)\longrightarrow A_\mu(x)+\frac{\partial}{\partial x_\mu}\Lambda(x) \tag{10.6.16}$$

いわゆるゲージ変換の自由度を用いて，(*10.6.14*)の方程式を

$$\Box A_\mu(x)=0 \tag{10.6.17}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}A_\mu(x)=0 \tag{10.6.18}$$

の2つにわける．また $L(x)$ として，(*10.6.15*)にかわって，

$$L(x) = -\frac{1}{4}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}A_\nu(x) - \frac{\partial}{\partial x_\nu}A_\mu(x)\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}A_\mu(x)\right)^2 \qquad (10.6.15')$$

を採用すると，Euler 方程式としては(*10.6.17*)式のみが導かれる．したがって後者のいわゆる Lorentz 条件式に対しては，別の考慮が必要になる．上の新しい L の下での $\boldsymbol{A}$, A_0 に対する正準共役量 $(\partial/\partial x_0)\boldsymbol{A}$, $(\partial/\partial x_0)A_0$ に対して，Bose 型の交換関係を設定し，スカラー場の場合と同様に，

$$A_\mu(x) = \int_\sigma d\sigma_\nu' D(x-x')\frac{\partial'}{\partial x_\nu'}A_\mu(x') \qquad (10.6.19)$$

に注意すると，

$$[A_\mu(x), A_\nu(x')] = i\delta_{\mu\nu}D(x-x') \qquad (\mu, \nu=1, 2, 3, 4) \qquad (10.6.20)$$

が得られる．ただし $D(x)$ は(*10.4.13*)の Δ 関数において $\kappa=0$ とした不変関数である．その具体的な形は，

$$D(x) = \frac{-1}{2\pi}\epsilon(x_0)\delta(x_\mu{}^2). \qquad (10.6.21)$$

(*5.6.20*)の交換関係は，(*10.6.18*)の Lorentz 条件とは両立しないことがわかる．そこで後者を演算子の方程式として設定することはせずに，つぎのように物理的に許される**状態関数への付加条件**として考慮することにする．

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}A_\mu(x)\Psi = 0. \qquad (10.6.22)$$

これは Fermi の条件と呼ばれている．

ここで前項 a)での多電子系との相互作用のある場合に戻ろう．(*10.6.6*)での $\tilde{A}_\mu(x)$ は上述の自由場 $A_\mu(x)$ と同様に，

$$\Box\tilde{A}_\mu(x) = 0 \qquad (10.6.23)$$

$$[\tilde{A}_\mu(x), \tilde{A}_\nu(x')] = iD(x-x') \qquad (10.6.24)$$

に従う．しかし A_μ に対する(*10.6.22*)の Fermi の条件式は，電子系との相互作用をもたない場合のもので，したがって Ψ も時間依存のない Heisenberg 描像での状態関数であった．しかしいまの場合は，状態関数は(*10.6.11*)に従う $\tilde{\Psi}$ であるから，これが(*10.6.22*)に対応する式

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu}\tilde{A}_\mu(x)\tilde{\Psi} = 0 \qquad (10.6.22')$$

を満たすという保証はない．実際，一般に $F\tilde{\Psi}=0$, $G\tilde{\Psi}=0$ の 2 つの方程式があるとき，$[F,G]\tilde{\Psi}=0$ が導かれる．このとき $[F,G]$ が F, G とは独立な新しい演算子であれば，$\tilde{\Psi}$ に第 3 の条件を課すことになり，その意味ではじめの $F\tilde{\Psi}=0$ と $G\tilde{\Psi}=0$ の両立性が一般には保証されなくなる．ところで(*10. 6. 11*)の n 個の方程式については，括弧内の量は $x_\mu{}^s$ $(s=1,2,\cdots,n)$ が相互に **'空間的'** であれば，(*10. 6. 24*)のために相互に可換となり，両立性について問題ない．しかしそれらの量は $(\partial/\partial x_\mu)\tilde{A}_\mu(x)$ とは，一般に可換ではない．そこで(*10. 6. 22′*) を修正して，

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\tilde{A}_\mu(x)+\varepsilon\sum_{s=1}^{n}D(x-x^s)\right)\tilde{\Psi}(\{x_\sigma{}^s\},F)=0 \qquad (10.6.25)$$

を採用すると，左辺の括弧内の式は，(*10. 6. 11*)の n 個の方程式の括弧内の式とすべて可換で，両立性が保証される．

かくして系の基礎方程式(*10. 6. 11*), (*10. 6. 25*), (*10. 6. 23*), (*10. 6. 24*)はすべて相対論的な形に定式化された．しかしここで Fermi の条件(*10. 6. 25*)について若干注意が必要である．実際，(*10. 6. 22*)がすでに問題であるが，まず(*10. 6. 25*)から次式が導かれることに注意しよう．

$$\left(\tilde{\Psi},\left[\frac{\partial}{\partial x_\mu}\tilde{A}_\mu(x)+\varepsilon\sum_{s=1}^{n}D(x-x^s),\ \tilde{A}_\nu(y)\right]\tilde{\Psi}\right)=0. \qquad (10.6.26)$$

ところで，(*10. 6. 24*)の交換関係によれば，上式の左辺の交換関係は $i\hbar(\partial/\partial x_\nu)D(x-y)$ となって，0 とはならない．この矛盾を救うために，(*10. 6. 25*)の Fermi の条件が x_0 について正の振動数部分と負の振動数部分からなる 2 つの条件式に分離できる点に注意して，改めて前者のみを付加条件 (Gupta の条件) として採用しよう．すなわち

$$\left\{\frac{\partial}{\partial x_\mu}\tilde{A}_\mu{}^{(+)}(x)+\varepsilon\sum_{s=1}^{n}D^{(+)}(x-x^s)\right\}\tilde{\Psi}=0. \qquad (10.6.27)$$

こうすれば，(*10. 6. 26*)のような内部矛盾をひきおこすことがなく，かつ**期待値**においては Lorentz 条件

$$\left(\tilde{\Psi},\left\{\frac{\partial}{\partial x_\mu}\tilde{A}_\mu(x)+\varepsilon\sum_{s=1}^{n}D(x-x^s)\right\}\tilde{\Psi}\right)=0 \qquad (10.6.28)$$

が保証されることになる．

このほか，(*10. 6. 24*)による輻射場の量子化からは，Hilbert 空間に A_0 成分に伴う不定計量が持ちこまれることが知られている．しかしこの場合は，上述の付

加条件のために，§10.7で述べるような原理的な困難は生じない(本講座第10巻『素粒子論』，§3.2参照).

c)　場の超多時間理論

上の多時間理論は相対論的に不変な形式をもつが，電子系についてはその個数が一定の多体系に限定されている点で不満足である．そこで輻射場のみならず，電子系も量子化された場によって記述し，かつ完全に相対論的な量子論は不可能かどうか．そのようなプログラムは，朝永およびSchwingerによってなしとげられた．以下では，上述の多時間理論との類似をできるかぎり保持しながら，その概略を述べる．

いま各種の場の相互作用系を考える．そのSchrödinger方程式

$$\left(\bar{H}-i\frac{\partial}{\partial T}\right)\Psi(T)=0 \qquad (10.6.29)$$

のハミルトニアン $\bar{H}$ は，つぎのような構造をもつ．

$$\bar{H}=\int d^3\boldsymbol{x}\left[\sum_A H_A(u_A(\boldsymbol{x}),\pi_A(\boldsymbol{x}))+H_{\rm I}(u_A(\boldsymbol{x}),u_B(\boldsymbol{x}),\cdots)\right]. \qquad (10.6.30)$$

ここに H_A は，場 u_A を自由場とするときのハミルトニアン密度，$H_{\rm I}(x)$ は相互作用を記述する．たとえば電子と輻射場との相互作用系においては，

$$H_{\rm I}(\boldsymbol{x})=ie\bar{\psi}(\boldsymbol{x})\gamma_\mu\psi(\boldsymbol{x})A_\mu(\boldsymbol{x}). \qquad (10.6.31)$$

ここでつぎのユニタリー変換

$$\Omega(T)=e^{i\sum_A \bar{H}_A T}\Psi(T) \qquad (10.6.32)$$

をほどこすと，(10.6.29)は

$$i\frac{\partial}{\partial T}\Omega(T)=\int d^3\boldsymbol{x}H_{\rm I}(u_A(\boldsymbol{x},T),u_B(\boldsymbol{x},T),\cdots)\Omega(T). \qquad (10.6.33)$$

ここに $H_{\rm I}$ の中の $u_A(\boldsymbol{x},x_0)$ は

$$u_A(\boldsymbol{x},x_0)\equiv e^{i\bar{H}_A x_0}u_A(\boldsymbol{x})e^{-i\bar{H}_A x_0} \qquad (10.6.34)$$

で与えられ，自由場のHeisenberg方程式と交換関係を満たす．この描像は，通常**相互作用描像**と呼ばれているものである．ここでまた3次元空間を無限の微小体積素片に分割する§10.3の処方を用いると，(10.6.33)は

$$i\frac{\partial}{\partial T}\Omega(T)=\left\{\sum_s \delta^3\boldsymbol{x}^s H_{\rm I}{}^s(u_A{}^s(T),u_B{}^s(T),\cdots)\right\}\Omega(T) \qquad (10.6.35)$$

と書ける．これを多時間理論のときの(10.6.7)と比較して見ると，$\sum_{s=1}^{n}$ の有限和

のかわりに，ここでは無限個の空間点 $\boldsymbol{x}^s$ にわたる和が現れる．したがっていまは各 $\boldsymbol{x}^s$ に固有の時間 t^s $(=x_0{}^s)$，つまり無限個の個別時間を導入して Schrödinger 方程式(*10. 6. 35*)を，つぎの無限個の方程式の組によっておきかえる．

$$i\frac{\partial}{\partial t_s}\Omega(t_1, t_2, \cdots) = \delta^3\boldsymbol{x}^s H_{\mathrm{I}}{}^s(u_A{}^s(t_s), u_B{}^s(t_s), \cdots)\Omega(t_1, t_2, \cdots). \quad (10.6.36)$$

ここで，もし $x_\mu{}^s=(\boldsymbol{x}^s, ix_0{}^s)$ が，図 10.5 のように **'空間的'** な超曲面 σ の上におかれていれば，$H_{\mathrm{I}}{}^s$ は相互に可換で，したがって(*10. 6. 36*)のすべての式は相互に両立する．ここで $\delta^3\boldsymbol{x}^s\to 0$ の極限をとると，$\Omega(t_1, t_2, \cdots)\to\Omega(\sigma)$ のように，Ω は σ の汎関数となり，(*10. 6. 36*)式は

$$i\frac{\delta}{\delta\sigma(x)}\Omega(\sigma) = H_{\mathrm{I}}(u_A(x), u_B(x), \cdots)\Omega(\sigma) \qquad (10.6.37)$$

となる．左辺の汎関数微分は(*10. 2. 32*)によって定義されている．これが朝永-Schwinger の**場の超多時間理論**における Schrödinger 方程式である．これは相対論的不変性を満たし，かつ解を相互作用 H_{I} について摂動論的に求めるのに，きわめて適切な形を備えている．しかしここでは，その具体的な適用には立ち入らない(本講座第 10 巻『素粒子論』第 4 章参照)．

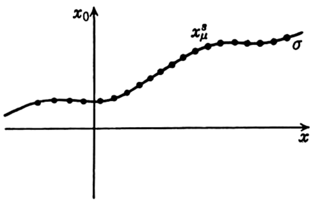


図 10.5

§10.7 不定計量をもつ場の量子論

a) 発散の困難と不定計量をもつ混合場の理論

これまでの場の量子論では，§10.2 のはじめの方で述べたように，はじめから大きな仮定がおかれている．つまり理論の**局所性**の仮定である．そこでは場自身が局所的であると同時に，相互作用も局所的であるとして議論が進められてきた．しかしこの仮定が現在の場の理論がもつ発散の困難の基本原因になっていることはよく知られている．一方前節の最後に述べた超多時間理論形式の相対論的場の理論が完成したことによって，この発散の構造を詳細に検討することが可能になり，少なくとも量子電磁気学に関しては，くりこみの処方によって，発散の背後

にある理論のリアリティが見事にえぐり出された.

素粒子論全体の発展の中で，くりこみ理論の成功をどのように位置づけるかは，むつかしい問題である．たとえば量子電磁気学における成功を，前期量子論が一定の対応論的領域で成功したのになぞらえる見解もある．発散の問題がどのようなメカニズムで生ずるかは，具体的な計算(本講座第10巻『素粒子論』第4章参照)の中味に立ち入らないと説明がむつかしいが，その原始的な現れは，場の局所性を反映する(*10. 4. 13*), (*10. 4. 14*)の不変 Δ 関数，$\Delta^{(1)}$ 関数の光円錐上の特異性にみられる．そこに現れる δ 関数は**擬関数**と呼ばれるもので，すなおな関数との積の積分を通じて意味のある量である．場の量子論の発散は，むしろこのような擬関数のいくつかの積の積分を通じて，すなわち光円錐上の特異性が重なる形で生じる.

そこで発散を避けるために，(*10. 4. 19*)の形の量子化，

$$[\phi(x), \phi(x')] = i\Delta(x-x') \qquad (10.7.1)$$

の $\Delta(x)$ から，光円錐上の特異性を除去することがいろいろ試みられてきた．その際，相対論的不変性と因果律の保証を目安とすると，新しい Δ 関数としては

$$\tilde{\Delta}(x) = \int d\kappa^2 \rho(\kappa^2)\Delta(x;\kappa^2) \qquad (10.7.2)$$

の形が考えられる．ここに(*10. 4. 13*)の Δ 関数を，κ を陽にして $\Delta(x,\kappa)$ と書いた．$\rho(\kappa^2)$ はスペクトル関数と呼ばれ，一般に離散的な部分と連続的な部分 $\rho_c(\kappa^2)$ とからなっている.

$$\rho(\kappa^2) = \sum_i c_i\delta(\kappa^2-\kappa_i{}^2)+\rho_c(\kappa^2) \qquad (10.7.3)$$

$\tilde{\Delta}(x)$ は $\Delta(x,\kappa)$ の1次結合であるから，相対論的に不変で，かつ空間的領域でゼロとなる．通常の場の理論でも，相互作用のあるときは，はじめの交換関係(*10. 7. 1*)はもはやc数でなくなるが，その真空期待値は上の $i\tilde{\Delta}(x-x')$ の形になることが知られている．そのとき(*10. 7. 2*)の形の表現は，Lehmann 展開と呼ばれる．この結論は，相互作用の詳細によらず，場の4元並進演算子としてのエネルギー運動量・ベクトル P_μ の存在，P_0 の最低固有状態としての真空(その固有値をゼロに規格化する)の存在，相対論的不変性などいくつかの公理論的仮定から導かれる．その際，P_μ の固有状態が完全直交系列をはり，そのノルムが**正確定**であればつねに

$$\rho(\kappa^2) \geqq 0 \tag{10.7.4}$$

で，かつ(*10.7.2*)の積分は$\kappa^2>0$の領域に限られることがわかる．しかしこのようにスペクトル関数が正確定であるかぎり，(*10.4.13*)の表現からして$\tilde{\Delta}$の光円錐上の特異性は除去されない．そこで場の理論の発散から脱却をはかる1つの方法として，自由場の量子化それ自体を

$$[\Phi(x), \Phi(x')] = i\tilde{\Delta}(x-x') \tag{10.7.5}$$

とし，$\rho(\kappa^2)$の正確定の条件をはずすことによって，光円錐上の特異性を取除く可能性が古くから追究されてきた．その例として，**混合場の理論**，それを形式化したregulatorの方法，Heisenbergの統一場の理論などがあげられる．

Δ関数，$\Delta^{(1)}$関数の特異性は，つぎの$\Delta^{(\pm)}$関数の光円錐近傍$({x_\mu}^2\sim 0)$の振舞い

$$\Delta^{(\pm)}(x, \kappa) = \frac{\epsilon(x_0)}{4\pi}\delta({x_\mu}^2) \pm \frac{i}{4\pi^2 {x_\mu}^2} \pm \frac{i\kappa^2}{8\pi^2}\ln\frac{\kappa|{x_\mu}^2|^{1/2}}{2}$$
$$+\frac{\kappa^2}{16}\varepsilon(x_0)\theta(-{x_\mu}^2)+O(\sqrt{|{x_\mu}^2|}\ln|{x_\mu}^2|) \tag{10.7.6}$$

から，(*10.4.42*)，(*10.4.45*)を通じて与えられる．そこで(*10.7.3*)で離散的部分だけをとり，

$$\sum_i c_i = 0, \quad \sum_i {\kappa_i}^2 c_i = 0, \quad \cdots, \quad \sum_i {\kappa_i}^{2n} c_i = 0 \tag{10.7.7}$$

のように，つぎつぎに高い条件を(c_i, κ_i)の間に課してゆくと，最初の2つの条件で上の各種のΔ関数に対応する$\tilde{\Delta}$関数の特異性はすべて除去され，最後にそれらの$(n-1)$次の微係数までが連続になる．(*10.7.7*)の条件は，Pauli-Villarsの**regulatorの条件**と呼ばれる．

一方連続的なスペクトル$\rho_c(\kappa^2)$を用いる興味ある例として，

$$\rho(\kappa^2) = \delta(\kappa^2) - \frac{a}{2\kappa}J_1(a\kappa) \tag{10.7.8}$$

を考える．このときの$\tilde{\Delta}$を$\tilde{D}_a$と記すと

$$\tilde{D}_a(x) = \frac{-\varepsilon(x_0)}{2\pi}\delta({x_\mu}^2+a^2). \tag{10.7.9}$$

これは図10.6に見るように，$D(x)$関数の光円錐上の特異性を時間的領域にずらしたもので，aを**長さの普遍定数**に結びつけて，Markovによって提唱されたものである．上式の導出の過程で

$$\int_0^\infty xyJ_1(xy)J_1(xz)\,dx = \delta(y-z) \qquad (10.7.10)$$

を用いた.

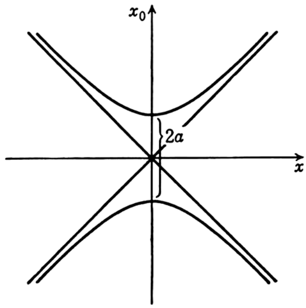


図 10.6

しかし, 以上のように, 光円錐上の特異性を除去しようとすると, (10.7.7), (10.7.8) に見るように, スペクトル関数の正確定の条件を必ずとりはずす必要が生ずる. 以後離散的なスペクトル関数の場合に限定して話を進めよう. このとき (10.7.5) の交換関係を満たす場 $\Phi(x)$ は, いかなる内容をもつか調べてみよう. それは単純な Klein-Gordon 型方程式を満たすことはなく, むしろ種々の質量 κ_i をもつ相互に独立な場 $\phi_i(x)$ の重ね合わせによって表されるはずである.

$$\Phi(x) = \sum_i \alpha_i\phi_i(x) \qquad (\alpha_i\text{: 実数}). \qquad (10.7.11)$$

これを (10.6.5) に代入すると,

$$[\Phi(x), \Phi(x')] = \sum_i \alpha_i^2[\phi_i(x), \phi_i(x')] = i\sum c_i\Delta(x-x', \kappa_i). \qquad (10.7.12)$$

これより

$$c_i = \varepsilon_i(\alpha_i)^2, \qquad \varepsilon_i = \pm 1 \qquad (10.7.13)$$

$$[\phi_i(x), \phi_i(x')] = i\epsilon_i\Delta(x-x', \kappa_i) \qquad (10.7.14)$$

の選択が要請される.

ここで重要なことは, (10.7.14) の符号因子 ε_i の出現である. ϵ が正の場合は, §10.4 で考察したスカラー場と同じで問題はない. しかし ϵ が負の場合, すなわち

$$[\phi(x), \phi(x')] = -i\Delta(x-x') \qquad (10.7.15)$$

のときは, (10.4.27) が符号をかえ,

$$\left.\begin{aligned}&[a(\boldsymbol{k}), a^\dagger(\boldsymbol{k}')] = -\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\\&[a(\boldsymbol{k}), a(\boldsymbol{k}')] = 0\end{aligned}\right\} \qquad (10.7.16)$$

となる. ここで真空の定義を (10.4.36) と同じく

$$\left.\begin{aligned}&a(\boldsymbol{k})|0\rangle = 0\\&\langle 0|0\rangle = 1\end{aligned}\right\} \qquad (10.7.17)$$

とすると，場の真空期待値も(*10. 4. 41*), (*10. 4. 44*)において符号を変え，

$$\langle 0|\phi(x)\phi(x')|0\rangle = -i\Delta^{(+)}(x-x') \qquad (10.7.18)$$

$$\langle 0|\{\phi(x),\phi(x')\}|0\rangle = -\Delta^{(1)}(x-x') \qquad (10.7.19)$$

となる．かくして場 $\Phi(x)$ について見ると，

$$\Phi^{(+)}(x)|0\rangle = 0 \qquad (10.7.20)$$

$$\langle 0|\{\Phi(x),\Phi(x')\}|0\rangle = \sum_i c_i\Delta^{(1)}(x-x',\kappa_i) \qquad (10.7.21)$$

となって，$\Delta^{(1)}$ 関数の光円錐上の特異性も除去される．

b）不定計量の導入

ところで(*10. 7. 16*)の交換関係および(*10. 7. 17*)の真空によって，Hilbert 空間を構成すると，必然的に不定計量をもつ状態がもちこまれる．簡単な例として $a^\dagger(\boldsymbol{k})|0\rangle$ の内積を計算してみると，

$$\{\langle 0|a(\boldsymbol{k}')\}\{a^\dagger(\boldsymbol{k})|0\rangle\} = -\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'). \qquad (10.7.22)$$

さらに一般に状態ベクトル $a^{\dagger n}(\boldsymbol{k})/\sqrt{n!}\,|0\rangle$ は，n が偶数のときは正のノルム，n が奇数のときは負のノルムをもつことが確かめられる．

このような擬似 Hilbert 空間を定式化するのには，通常の Hilbert 空間の場合と同様に，ケット・ベクトル $|\alpha\rangle$ のつくる空間に対して，ブラ・ベクトル $\langle\alpha|$ のつくる空間を導入して，その間に

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^* \qquad (10.7.23)$$

の関係を満たす**内積**を定義するが，$\langle\alpha|\alpha\rangle$ は実数であるだけで必ずしも正確定ではなくなる．それに伴って，ある演算子 A に対する従来の Hermite 共役演算子 $A^\dagger$ の概念も一般化され，随伴演算子(adjoint operator)となる．それは形式的には，Hermite 共役と同じく，$A|\alpha\rangle$ に対するブラ・ベクトル $\langle\alpha|A^\dagger$ を通じて定義され，$\langle\alpha|A|\beta\rangle=\langle\beta|A^\dagger|\alpha\rangle^*$ を満たす．しかしそのマトリックス表現に注意する必要がある．擬似 Hilbet 空間に規格化直交系列 $\{|n\rangle\}$ をもちこむとき，それは一般に

$$\langle n|n'\rangle = \epsilon_n\delta_{nn'} \qquad (10.7.24)$$

となって，符号因子 $\epsilon_n(=\pm 1)$ を含む．いま Hermite 演算子に対応する自己随伴演算子 $F\ (=F^\dagger)$ の行列要素を計算すると，

$$f_{nm} \equiv \langle n|F|m\rangle = \langle m|F|n\rangle^* = f_{mn}{}^* \qquad (10.7.25)$$

すなわち $[f_{nm}]$ は Hermite 行列を与える．しかし一方

$$F|m\rangle \equiv \sum_n F_{nm}|n\rangle \tag{10.7.26}$$

によって定義される F の表現行列 $[F_{nm}]$ は，その要素が

$$f_{nm} = \epsilon_n F_{nm} \tag{10.7.27}$$

を満たし，一般には Hermite 行列でなくなる．

以上のように，不定計量を持ちこめば，光円錐上に特異性のない場の理論が作れることがわかった．しかし(10.7.15)の交換関係の負符号だけからは，必ずしも不定計量の導入が不可避とはいえない．実際，これまでの生成・消滅演算子の役割をいれかえて，(10.7.17)の真空の定義を

$$\left.\begin{aligned} a^\dagger(\boldsymbol{k})|0\rangle &= 0 \\ \langle 0|0\rangle &= 1 \end{aligned}\right\} \tag{10.7.28}$$

にかえる．こうすると系の直交基底ベクトル $a^n(k)/\sqrt{n!}\,|0\rangle$ はすべて正のノルムをもつ．しかしこのとき真空期待値 $\langle 0|\{\phi(x),\phi(x')\}|0\rangle$ は，(10.4.44)の形に戻ってしまうことがわかる．そのため場 $\Phi(x)$ については

$$\langle 0|\{\Phi(x),\Phi(x')\}|0\rangle = \sum_i |c_i|\Delta^{(1)}(x-x',\kappa_i) \tag{10.7.29}$$

となって，$\Delta^{(1)}$ 関数の特異性は除去されないばかりでなく，真空も(10.7.20)のように場 $\Phi(x)$ を通じては簡潔に規定することができなくなる．

c) 多重質量波動方程式

上で述べたような性格の場 $\Phi(x)$ を，Lagrange 形式に従って力学的に導く試みとして，Pais-Uhlenbeck (1950) の仕事がある．彼らはつぎのような高階微分を含む Lagrange 密度関数を設定した．

$$L = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\Phi(x)\right)f(\Box)\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\Phi(x)\right) \tag{10.7.30}$$

ただし

$$f(\Box) = \prod_{i=1}^{N}\left(1-\frac{\Box}{\kappa_i{}^2}\right). \tag{10.7.31}$$

これからつぎの Euler 方程式が導かれる．

$$\Box f(\Box)\Phi(x) = 0. \tag{10.7.32}$$

時間について高階微分を含むラグランジアンの正準形式としては，Ostrogradski の方法が知られているが，ここでは少し別の相対論的に不変な方法をとる．まずつぎのような補助場を導入する．

$$\left.\begin{aligned}\phi_0(x) &= f(\Box)\Phi(x)\\ \phi_i(x) &= \frac{\Box}{\kappa_i^{2}}\prod_{l\neq i}\left(1-\frac{\Box}{\kappa_l^{2}}\right)\Phi(x)\end{aligned}\right\}. \qquad (10.7.33)$$

それらは，つぎの波動方程式を満たす．

$$\left.\begin{aligned}&\Box\phi_0(x) = 0\\ &(\Box-\kappa_i^{2})\phi_i(x) = 0 \qquad (i=1, 2, \cdots, N)\end{aligned}\right\}. \qquad (10.7.34)$$

ここで Φ 場の Lagrange 密度関数として(*10.7.30*)のかわりに

$$\tilde{L} = -\frac{1}{2}\sum_{j=0}^{N}\zeta_j\left\{\left(\frac{\partial}{\partial x_\mu}\phi_j\right)^2+\kappa_j^{2}\phi_j\right\} \qquad (10.7.35)$$

を採用する．ただし，$(N+1)$ 個の定数 ζ_j を適当に選んで，この $\tilde{L}$ は(*10.7.30*)の L とは $\partial/\partial x_\mu f_\mu(x)$ の形の項を除いて等しくなるようにする．このとき L と $\tilde{L}$ は同一の作用積分を与えることは，(*10.4.58*)の Dirac 場の場合について述べたのと同じである．実際(*10.7.33*)を(*10.7.35*)に代入して，(*10.7.30*)と比較すると，ややこみいった計算の後，ζ_j に対してつぎの条件式が得られる．

$$\zeta_0 f(\Box)-\sum_{j=1}^{N}\zeta_j\frac{\Box}{\kappa_j^{2}}f(\Box)\Big/\left(1-\frac{\Box}{\kappa_j^{2}}\right) = 1. \qquad (10.7.36)$$

まず $\Box=0$ とおいて，

$$\zeta_0 = 1. \qquad (10.7.37)$$

$\Box=\kappa_i^{2}$ とおいて

$$\zeta_j = -1/\prod_{l\neq i}(1-\kappa_i^{2}/\kappa_l^{2}) = 1/(\kappa_i^{2}f'(\kappa_i^{2})). \qquad (10.7.38)$$

こうして定められた ζ_i は，つぎの恒等式を満たす．

$$\sum_{i=0}^{N}\zeta_i\kappa_i^{2n} = 0 \qquad (n=0, 1, \cdots, N-1). \qquad (10.7.39)$$

また(*10.7.36*)は次の関係式を導く．

$$\Phi(x) = \zeta_0\phi_0-\sum_{i=1}^{N}\zeta_i\phi_i(x). \qquad (10.7.40)$$

系の一般化座標として，(*10.7.33*)の $\phi_i(x)$ $(i=0, 1, 2, \cdots, N)$ を選ぶと，それに共役な一般化運動量は

$$\pi_i(x) = \partial\tilde{L}/\partial_0\phi_i(x) = \zeta_i\partial\phi_i/\partial x_0 \qquad (10.7.41)$$

で与えられ，つぎの正準交換関係に到達する．

$$[\phi_i(x), \phi_j(x')] = i\delta_{ij}\frac{1}{\zeta_i}\Delta(x-x', \kappa_i). \tag{10.7.42}$$

これより

$$[\Phi(x), \Phi(x')] = i\left[D(x-x')+\sum_{i=1}^{N}\zeta_i\Delta(x-x', \kappa_i)\right]. \tag{10.7.43}$$

系のハミルトニアン $\bar{H}$ は，

$$\bar{H} = \frac{1}{2}\sum_{l=0}^{N}\zeta_l\int d^3\boldsymbol{x} : \left[\left(\frac{\partial}{\partial x_0}\phi_l\right)^2 + (\nabla\phi_l)^2 + \kappa_l^2\phi_l^2\right] :. \tag{10.7.44}$$

ここで(*10.7.38*)で定義される ζ_l の符号に注意しよう．$\kappa_1^2 < \kappa_2^2 < \cdots < \kappa_N^2$ とすれば，$f(z)$ は図10.7に示されるような関数であるから，ζ_i は i とともに符号を変える．

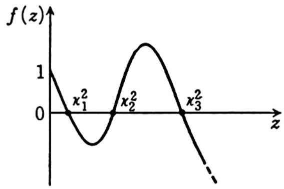


図10.7

この理論で

$$\zeta_i \longrightarrow c_i, \qquad \sqrt{|\zeta_i|}\,\phi_i \longrightarrow \phi_i \tag{10.7.45}$$

のおきかえをすれば，a)項の混合場の議論に移行することは明らかである．ここで $\bar{H}$ の構造を見るために，$\sqrt{|\zeta_i|}\,\phi_i(x)$ を(*10.4.26*)のようにFourier展開し，(*10.7.42*)の交換関係を考慮すると，

$$\left.\begin{aligned} &[a_i(\boldsymbol{k}), a_j^\dagger(\boldsymbol{k})] = \delta_{ij}\frac{\zeta_i}{\zeta}\delta(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \\ &[a_i(\boldsymbol{k}), a_j(\boldsymbol{k}')] = 0 \end{aligned}\right\}. \tag{10.7.46}$$

(*10.7.44*)の $\bar{H}$ はつぎのように書かれる．

$$\bar{H} = \sum_{i=0}^{N}\frac{\zeta_i}{|\zeta_i|}\int d^3\boldsymbol{k}\sqrt{\boldsymbol{k}^2+\kappa_i^2}\,a_i^\dagger(\boldsymbol{k})\,a_i(\boldsymbol{k}). \tag{10.7.47}$$

真空を(*10.7.17*)のように

$$\left.\begin{aligned} &a_i(\boldsymbol{k})|0\rangle = 0 \qquad (i=0, 1, 2, \cdots, N) \\ &\langle 0|0\rangle = 0 \end{aligned}\right\} \tag{10.7.48}$$

とすると，$\zeta_i/|\zeta_i| = -1$ の場に対しては不定計量が持ちこまれることになる．しかしここで注意すべきことは，すべての i についてその基底ベクトル $a_i^{\dagger n}/\sqrt{n!}\,|0\rangle$ における $\bar{H}$ の**固有値**は，つねに**正確定**である点である．

Pais と Uhlenbeck の扱ったのは，ここでの場 $\Phi(x)$ をベクトル場におきかえ

たもので，$\kappa_0=0$ の電磁ポテンシャル $A_\mu(0)$ に不定計量をもつ質量 κ_i の仮想的な場 $A_\mu^{(i)}$ を付随させ，発散のない量子電磁気学をつくることをめざした．しかしこの理論は κ_i の分布，すなわち**質量スペクトル**をきめる原理を欠いており，さらに，上述のように不可避的に**量子力学的な確率解釈**と相いれない不定計量をもつ粒子状態を導入せざるをえなくなる．後者の困難を打開する上で，さきに述べた重要な性質，すなわち系の保存量であるハミルトニアンの固有値はこの場合も正確定(期待値の符号は不確定)である点が注目される．実際，不定計量をもつ仮想的場の質量 κ_i^2 がいずれも十分大きく，その静止エネルギーが，現在われわれの知る素粒子反応エネルギー以上であるとすれば，それらの粒子が生成されて観測上の困難をひきおこすことなく，もっぱら発散の除去に役割を演じているとする理論的可能性が残る．しかしそのように大きな質量をもつ不定計量粒子の‘安定性’などについて，原理的にむつかしい問題が残されている．

以上本章で述べた場の量子論においては，はじめにも述べたように，**局所性**という大きな枠の中で議論をすすめてきた．このようなアプローチに対するアンチテーゼとして古くから**非局所場**の理論が追究されてきたが，詳細については，本講座第10巻『素粒子論』第14章を参照されたい．

第11章　拘束のある系に対する正準理論

この章では，拘束のある Hamilton 系に対する正準形式の一般理論をまず議論する．次にその応用として，光円錐に1つの母線で接する超平面上での場の正準理論とその量子化を，スカラー場を例にとって考察する．また，空間的超平面上での量子化と比較することによって，それとの共通点・相違点を調べる．

§11.1　Dirac の一般正準理論

拘束がある Hamilton 系に対する正準形式の一般理論は P. A. M. Dirac (1950) によって始められた．この節では一番簡単な有限自由度の系について考える．

a)　特異ラグランジアンと拘束

系のラグランジアンを

$$L(\dot{q}, q), \qquad q = (q_1, \cdots, q_N)$$

で表す．ここで $\dot{q}=dq/dt$ であり，L は t を陽には含まないとする．q_n に正準共役な運動量 p_n は

$$p_n = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_n} \qquad (n=1, \cdots, N) \tag{11.1.1}$$

で定義されるが，通常の系では上式を $\dot{q}$ について解いて

$$\dot{q}_n = f_n(p, q)$$

が得られる．

しかし p_n が $\dot{q}_n$ の独立な関数でなく，$\dot{q}$ について上式のように解くことができない場合がある．それはラグランジアンが特異(singular)，つまり

$$\det\left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}_n \partial \dot{q}_{n'}}\right) = 0 \tag{11.1.2}$$

が成り立つ場合である．上式左辺に出てくる行列の位数を $N-M$ $(<N)$ とする

と，その系は

$$\phi_m(p, q) = 0 \qquad (m=1, \cdots, M) \tag{11.1.3}$$

という M 個の独立な拘束(constraint)を持つことになり，系の運動は，初期条件と無関係に，$2N$ 次元の位相空間 Γ のうちの $2N-M$ 次元部分空間 Γ_1 内に限られてしまう．上のように，運動量の定義だけから出てくる拘束を**1次的拘束**(primary constraint)と呼ぶ．

系のハミルトニアンは

$$H(p, q) = \sum_{n=1}^{N} p_n\dot{q}_n - L(\dot{q}, q) \tag{11.1.4}$$

で与えられるから，その変分は

$$\delta H = \sum_{n=1}^{N} (\delta p_n\dot{q}_n + p_n\delta\dot{q}_n) - \sum_{n=1}^{N}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_n}\delta\dot{q}_n + \frac{\partial L}{\partial q_n}\delta q_n\right)$$

となるが，ここで p_n の定義式(11.1.1)を使うと

$$\delta H = \sum_{n=1}^{N}\left(\delta p_n\dot{q}_n - \frac{\partial L}{\partial q_n}\delta q_n\right)$$

を得る．拘束がある場合でも，H はやはり p と q だけの関数で表されることがわかる．

古典論で基本的な役割をはたす Poisson 括弧は

$$\{A, B\} \equiv \sum_{n=1}^{N}\left(\frac{\partial A}{\partial q_n}\frac{\partial B}{\partial p_n} - \frac{\partial B}{\partial q_n}\frac{\partial A}{\partial p_n}\right) \tag{11.1.5}$$

で定義されるが，それは第3章で知ったように

$$\{A, B\} = -\{B, A\} \tag{11.1.6a}$$

$$\{c_1A_1 + c_2A_2, B\} = c_1\{A_1, B\} + c_2\{A_2, B\} \tag{11.1.6b}$$

$$\{A, B_1B_2\} = \{A, B_1\}B_2 + B_1\{A, B_2\} \tag{11.1.6c}$$

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0 \tag{11.1.6d}$$

という代数的性質を持っている．正準変数が

$$\{q_n, p_{n'}\} = \delta_{nn'}$$

$$\{q_n, q_{n'}\} = \{p_n, p_{n'}\} = 0$$

を満たすことは，Poisson 括弧の定義からすぐにわかる．

拘束のない系では，物理量 A の時間的発展は

$$\dot{A} = \{A, H\}$$

で与えられる(第3章参照). しかし, 拘束がある場合には, 時間推進の生成子(generator)として, (*11.1.4*)で与えられる H に ϕ_m の任意の1次結合をつけ加えるべきである. つまり, H のかわりに

$$H^* = H + \sum_{m=1}^{M} u_m \phi_m \tag{11.1.7}$$

を取らなければならない. ここで u_m は q, p だけでなく, $\dot{q}$ にもよる関数である. $2N$ 個の変数 q と p の間には M 個の拘束があるから, 独立な変数は $2N-M$ 個しかなく, M 個の u を加えてはじめて $2N$ 個の Lagrange 変数 q と $\dot{q}$ が表現できる. その意味で, p, q, u は Hamilton 変数とも呼ばれる.

新しいハミルトニアン H^* による A の時間的発展は

$$\dot{A} = \{A, H^*\} \tag{11.1.8}$$

で与えられるが, (*11.1.7*)式右辺の u_m は p と q だけでは表せないから, Poisson 括弧の定義を拡張しておかなければならない. しかしわれわれの目的にとっては, 一般の Poisson 括弧を具体的に与える必要はなく, それに対して(*11.1.6*)と同じ代数的性質を要求するだけで十分である. (*11.1.7*)を(*11.1.8*)に代入して

$$\dot{A} = \{A, H\} + \sum_{m=1}^{M} u_m \{A, \phi_m\} + \sum_{m=1}^{M} \{A, u_m\} \phi_m$$

を得る.

ここで, すべての拘束(*11.1.3*)が満たされているときにだけ等号を意味する記号として, $\approx$ を使うことにしよう. ($2N-M$ 次元部分空間 Γ_1 でだけ成り立つ等号という意味で, $\underset{\Gamma_1}{=}$ と書くことも多く, この方が正確である.) そうすると, 上式最右端の項は落ちて

$$\dot{A} \approx \{A, H\} + \sum_{m=1}^{M} u_m \{A, \phi_m\} \tag{11.1.9}$$

と書ける. 記号 $\approx$ を **weakly equal** という. これに対し, $=$ を $\approx$ と区別するときには, 前者を **strongly equal** という. 上できめた約束のもとでは, (*11.1.3*)式は

$$\phi_m(p, q) \approx 0 \tag{11.1.3'}$$

と書かねばならない. 注意すべき点は, Poisson 括弧を取る前に $\phi_m \approx 0$ と置いてはならないことである. Poisson 括弧は微分操作を含んでいるから, $\phi_m \approx 0$ でも

括弧を取った後の量が ≈ 0 となるとは限らないことは明らかだろう．

ここで，拘束関数 ϕ の選び方についてふれておきたい．ϕ のかわりに，たとえば ϕ^2，あるいは $\phi^{1/3}$ を取ってもよいように思えるが，どれを選ぶべきかという問題である．ある ϕ に対して，$\{p_n, \phi\}$ および $\{q_n, \phi\}$ のいずれもが $\not\approx \infty$ で，かつそれら全部が ≈ 0 になることはないとき，ϕ を正規な拘束関数と呼ぶことにしよう．もし ϕ が正規なら，ϕ^2 と p または q との Poisson 括弧はすべて ≈ 0 になるから，ϕ^2 は正規ではない．このような拘束関数は $=0$ と考えてよい．また $\phi^{1/3}$ と p または q との Poisson 括弧の中には $\approx \infty$ となるものがあるから，$\phi^{1/3}$ もやはり正規ではない．以後，いちいち断らないが，拘束関数としてはつねに正規なものを取ることにする．ある量 A が ≈ 0 であるとすると，$A=f(\phi_m; p, q, u)-f(0; p, q, u)$ と書けるが，2つ以上の ϕ の積は $=0$ と考えてよいから，A を ϕ_m の1次結合

$$A = \sum_{m=1}^{M} c_m \phi_m, \qquad c_m(p, q, u) \equiv \left(\frac{\partial f}{\partial \phi_m}\right)_{\phi=0}$$

で表すことができる(簡単のため，拘束関数のことも単に拘束と呼ぶことが多い)．

ところで，理論がコンシステントであるためには，(*11. 1. 3′*)が任意の時刻で成り立たなければならない．それには

$$\begin{aligned}\dot{\phi}_m &= \{\phi_m, H^*\} \\ &\approx \{\phi_m, H\} + \sum_{m'=1}^{M} u_{m'} \{\phi_m, \phi_{m'}\} \\ &\approx 0 \qquad\qquad (m=1, \cdots, M) \end{aligned} \qquad (11.\,1.\,10)$$

が必要であるが，上式が成り立てば，ϕ_m のより高次の時間微分もすべて ≈ 0 となることは，≈ 0 が ϕ_m のある1次結合を意味することを考えれば，すぐに理解できるだろう．上式が u を含んでいれば，それは u に対する条件を与える．そうでないときには，それが恒等式でない限り，1つの新しい拘束が得られたことになる．理論のコンシステンシィから必要となるこの新しい拘束は**2次的拘束**(secondary constraint)と呼ばれるが，それがまた任意の時刻で成り立つためには，(*11. 1. 10*)と同じような式が必要となる．ここでのべたことを

$$L = \frac{m}{2}(\dot{q}_1{}^2 + \dot{q}_2{}^2) + \lambda \dot{q}_3 (q_1 - q_2) - \frac{\omega}{2}(q_1 - q_2)^2, \qquad \lambda \neq 0$$

で与えられる特異ラグランジアンで具体的に見てみることをすすめる.

有限自由度の系では拘束の数も有限だから，この操作は必ず有限回で終り，結局もとからの 1 次的拘束(*11. 1. 3′*)のほかに，いくつかの 2 次的拘束

$$\phi_k(p, q) \approx 0 \qquad (k=M+1, \cdots, M+K) \tag{11. 1. 11}$$

と，u に対する条件式

$$\{\phi_j, H\} + \sum_{m=1}^{M} u_m \{\phi_j, \phi_m\} \approx 0 \tag{11. 1. 12}$$

を得る．上式の ≈ は，2 次的拘束をも含めてすべての拘束が満たされているときに等号となる．また ϕ の添字 j は，1 から $M+K$ までのうち，上式が恒等式または 2 次的拘束に帰着する場合を除いた高々 M 個の値をとる.

前式(*11. 1. 12*)を u に対する非斉次方程式と考えると，理論がコンシステントである場合には解 u は必ず存在するが†，u に対する解は一般に一意的ではない. 1 つの解 $u_m \approx U_m$ が存在すると，斉次方程式の解 V_{am}

$$\sum_{m=1}^{M} V_{am} \{\phi_j, \phi_m\} \approx 0 \tag{11. 1. 13}$$

と任意関数 v_a とを用いて，u に対する一般解は

$$u_m \approx U_m + \sum_a v_a V_{am} \tag{11. 1. 14}$$

の形に表せる．この u を(*11. 1. 7*)の H^* に代入すると

$$H^* \approx H + \sum_{m=1}^{M} \left\{ U_m + \sum_a v_a V_{am} \right\} \phi_m$$

を得るが，2 つの拘束関数の積からなる項は Poisson 括弧を取る前でも落としてよいから，≈ でなく = を用いて

$$H^* = H' + \sum_a v_a \phi_a \tag{11. 1. 15}$$

と書ける．ただし

$$H' = H + \sum_{m=1}^{M} U_m \phi_m \tag{11. 1. 16}$$

$$\phi_a = \sum_{m=1}^{M} V_{am} \phi_m \tag{11. 1. 17}$$

である.

---

† (*11. 1. 12*)式の解が存在しない時には，最初にとったラグランジアンは捨てなければならない.

ここで物理量あるいは拘束に対して，第1種と第2種という区別を定義しておこう．ある量 A がすべての拘束に対して

$$\{A, \phi_j\} \approx 0 \qquad (j=1, \cdots, M+K)$$

を満たすとき，A を第1種(first class)の量，そうでない時は第2種(second class)の量という．A, B がともに第1種の量なら，両者の Poisson 括弧 $\{A, B\}$ も第1種の量であることは，Jacobi の恒等式(*11. 1. 6d*)を用いて簡単に確かめられる．ラグランジアンから最初に得られるハミルトニアン H は一般には第1種の量とは限らないが，(*11. 1. 16*)で与えられる H' は第1種になっていることに注意しよう．また(*11. 1. 17*)で与えられる ϕ_a は第1種の拘束である．H から H^* へ移ることによって，ハミルトニアンが第1種の量になったわけである．

理論のコンシステンシィが要求するすべての条件を満たしても，一般にはなお v_a という任意性が残る．この場合，ある時刻での力学変数 $p(t_0), q(t_0)$ を与えても，

$$\left.\begin{aligned} \dot{p}_n &\approx \{p_n, H'\} + \sum_a v_a \{p_n, \phi_a\} \\ \dot{q}_n &\approx \{q_n, H'\} + \sum_a v_a \{q_n, \phi_a\} \end{aligned}\right\} \qquad (11.\,1.\,18)$$

からわかるように，後の時刻での力学変数は完全には決まらない．もちろん物理的状態は完全に決まるはずだから，このことは物理的状態と $p(t), q(t)$ とは1対多(one to many)の対応になっていることを意味する．そして，ϕ_a は物理的状態を変えないような無限小接触変換の生成子にほかならない．

物理的状態を変えない変換は一般にゲージ変換と呼ばれるが，ϕ_a, ϕ_b をゲージ変換の生起子とすると，$\{\phi_a, \phi_b\}$ もやはりゲージ変換の生成子となる．ϕ_a, ϕ_b が第1種の拘束だから，$\{\phi_a, \phi_b\}$ も第1種の拘束の1次結合で表されるが，それは1次的拘束とは限らない．しかし拘束が1次的か2次的かという区別は物理的にはあまり意味がない．ゲージ変換の生成子としてはたす役割には何の違いもないからである．したがって，(*11. 1. 15*)において ϕ_a を1次的な拘束に限る理由は全然ない．最も一般的なハミルトニアンとして，(*11. 1. 15*)のかわりに

$$H_{\mathrm{T}} = H' + \sum_a v_a \phi_a \qquad (11.\,1.\,19)$$

を考えるべきである．(*11. 1. 15*)との違いは，a についての和はすべての独立な第1種の拘束についてとる点である．2次的拘束が新しくつけ加わっても，それ

が第1種であるために，今までの議論は全く影響を受けないことに注意しよう．

b)　Dirac 括弧と量子論への移行

第2種拘束 ϕ_j の適当な1次結合を取ることによって，第1種の拘束が得られることがある．そのようにして可能なかぎり第1種の拘束に移していっても，どうしても第1種にはできない拘束が残るとき，そのような拘束を第2種拘束の既約な組という．それを

$$\chi_s(p, q) \approx 0 \qquad (s=1, \cdots, S)$$

で表そう．そうすると

$$C_{ss'} \equiv \{\chi_s, \chi_{s'}\} \tag{11.1.20}$$

で定義される S 行 S 列の行列は

$$\det(C) \not\approx 0 \tag{11.1.21}$$

という性質を持つ．もし $\det(C) \approx 0$ だとすると，χ_s の適当な1次結合を取ることによって第1種の拘束がつくれることが証明でき，χ_s が第2種拘束の既約な組に属することと矛盾するからである．逆に，第2種拘束 χ_s が(*11.1.21*)という性質を持つとき，χ_s は既約な組をつくる．C は反対称行列だから，S が奇数なら，$\det(C)=0$ となる．したがって，既約な第2種拘束の数 S はつねに偶数でなければならない．

(*11.1.21*)により C には逆行列が存在するから，それを C^{-1} で表わし，**Dirac 括弧**を

$$\{A, B\}_{\mathrm{D}} \equiv \{A, B\} - \sum_{s=1}^{S} \{A, \chi_s\}(C^{-1})_{ss'}\{\chi_{s'}, B\} \tag{11.1.22}$$

で定義する．この Dirac 括弧は，もとの Poisson 括弧に対する(*11.1.6*)と全く同じ代数的性質を持っている(最初の3性質はすぐに確かめられるが，最後の Jacobi の恒等式については，たとえば，巻末の [Dirac](1950) を参照されたい)．Dirac 括弧の定義から，A と B の少なくとも一方が第1種の量であれば

$$\{A, B\}_{\mathrm{D}} \approx \{A, B\}$$

となる．(*11.1.18*)で与えた H_{T} は第1種であるから，物理量 A の時間的発展は Dirac 括弧によって

$$\dot{A} \approx \{A, H_{\mathrm{T}}\}_{\mathrm{D}} \tag{11.1.23}$$

で表すことができる．

Dirac 括弧がすぐれているのは，(*11. 1. 22*) より

$$\{A, \chi_s\}_{\mathrm{D}} = \{A, \chi_s\} - \sum_{s', s''=1}^{S} \{A, \chi_{s'}\}(C^{-1})_{s's''}C_{s''s}$$
$$= \{A, \chi_s\} - \{A, \chi_s\} = 0$$

となるため，Dirac 括弧の中でさえ既約な第2種拘束を

$$\chi_s = 0 \qquad (11.\,1.\,24)$$

とおいてよい点である．いいかえると，Dirac 括弧の導入によって，物理的に余分な自由度に対応する第2種の拘束を消去することができた．

第1種の拘束について一言つけ加えておく．それがゲージの自由度に対応することを先に述べた．このようなゲージの自由度は，そのまま残しておく方が理論上望ましいこともあるが，適当なゲージ条件を課すことによってハミルトニアンの任意性を除いてしまう方が簡単なことも多い．それには，消去すべき第1種の拘束 $\phi_a \approx 0$ に適当な拘束 $\tilde{\phi}_a \approx 0$ をつけ加えることによって，両者を既約な第2種の拘束に変え，新しい Dirac 括弧に移ってこれらを消去すればよい．

古典論から量子論への移行は，Dirac 括弧を交換子 (commutator) と見直すことによって，つまり

$$\{A, B\}_{\mathrm{D}} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar}[A, B] \qquad (11.\,1.\,25)$$

という置き換えによって行なわれる．波動関数 $\psi(q, t)$ に対する Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = H_{\mathrm{T}}\psi \qquad (11.\,1.\,26)$$

で与えられる．第2種拘束は演算子方程式

$$\chi_s(p, q) = 0 \qquad (11.\,1.\,27)$$

を満たすが，第1種拘束は ψ に対する補助条件

$$\phi_a\psi = 0 \qquad (11.\,1.\,28)$$

と見なさなければならない．この条件のため，Schrödinger 方程式 (*11. 1. 26*) は

$$i\hbar\frac{d\psi}{dt} = H'\psi \qquad (11.\,1.\,29)$$

と書くことができ，ψ には v_a の任意性が現れない．

実は一般論を考えると，量子論への移行にはやっかいな問題がある．それは拘

束がない系でも起こりうることだが，物理量が可換でなくなるため，対応する演算子の掛算の順序が古典論からは決められない．したがって，対象とする系に応じて，理論が矛盾なく構成できるような掛算の順序を見つける必要がある．今までのべてきた議論では，たとえば第1種の拘束 ϕ_a と $\phi_{a'}$ との交換子が

$$[\phi_a, \phi_{a'}] = \sum_{a''} C_{aa',a''}\phi_{a''} \tag{11.1.30}$$

のように，右辺で $\phi_{a''}$ がつねに一番右に来る形に書けないと困る．幸いなことに，われわれが普通取り扱う系では，掛算の順序が大きな問題になることはまずないと言ってよい．

以上のべてきた有限自由度の系に対する議論を，無限自由度の系である場の理論に拡張することには，たいていの場合特別の困難はない．なお，ここでは触れることができないが，巻末にあげた文献 [Hanson, Regge, Teitelboim] には相対論的質点，相対論的こま，弦模型，電磁場，Yang-Mills ゲージ場，重力場などいろいろな問題への応用がまとめられている．次節では，一般正準理論の1つの興味ある適用例として，空間的でない超平面上での場の正準量子化という可能性を取りあげることにする．

§11.2 光的超平面上での場の正準理論

a) 正準量子化面とその安定群

前章でくわしく述べられたように，相対論的な場の量子論の研究は，Heisenberg-Pauli の論文(1929)によってその理論的基礎が与えられた．彼らは自由場を無限個の調和振動子の重ね合せとしてとらえることによって，同時刻での場の正準交換関係を導いた．これが Heisenberg-Pauli による場の正準量子化である．

正準形式では，4次元 Minkowski 時空は3次元の空間的超平面(または超曲面)と，ある時間的方向にそって動く1パラメーターとで表され，後者が時間，前者がある時刻での空間という役割を受け持つ．4次元時空をこのように分割して考えることは，理論の Lorentz 不変性をはっきりさせるためには必ずしも望ましいことではないが，正準形式のとらえ方はある時刻での状態というわれわれの伝統的な考え方とよく対応している．また古典論から量子論への移行が比較的容易であるということも，正準形式のもう1つの利点としてあげることができよ

う．そこで以下ではわれわれの議論を正準量子化に限定することにするが，その範囲内で，Heisenberg-Pauli の量子化よりもう少し広い視野から場の正準量子化という問題を見直してみたい．

Heisenberg-Pauli の量子化の一番大きな特徴は，量子化を行う面(以下では**量子化面**と呼ぶ)として時刻一定の超平面，より一般には空間的超曲面を取っていることである．話をいたずらに複雑にしないために，量子化面としては以後超平面だけを考えることにしよう．いま，4次元時空の原点を含むすべての空間的超平面の集まりを C_S とすると，その任意の2つの面は互いに Lorentz 変換によって移り変われる．したがってどの面上で量子化を行っても，それは時刻 $x^0=0$ の面上での量子化とユニタリー同等である．したがって，もし Heisenberg-Pauli とは別な量子化を考えようとすると，どうしても‘空間的’という制限をやめなければならない．しかし，量子化面として空間的でない超平面を取ることは許されるだろうか？

ここで，Poincaré 群の生成子についてその性質を簡単に復習しておこう．第8章でのべられたように，Poincaré 群は Lorentz 群と時空推進群とからできている．Lorentz 群の6個の生成子は，空間回転をひき起こす角運動量 J_i と，Lorentz ブーストを起こす K_i $(i=1,2,3)$ とで与えられ，それらは

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k \tag{11.2.1a}$$

$$[J_i, K_j] = i\epsilon_{ijk}K_k \tag{11.2.1b}$$

$$[K_i, K_j] = -i\epsilon_{ijk}J_k \tag{11.2.1c}$$

という $SL(2, \mathrm{C})$ の交換関係を満たす．また時空推進群の4個の生成子はエネルギー運動量 $P_\mu=(P_0, P_i)$ で与えられ，可換群 $T(4)$ をつくる．J_i と P_μ との交換関係は省略するが，K_i と P_μ との交換関係は

$$[K_i, P_0] = iP_i \tag{11.2.2a}$$

$$[K_i, P_j] = i\delta_{ij}P_0 \tag{11.2.2b}$$

である．数学的には，Poincaré 群は Lorentz 群と時空推進群の半積 $SL(2, \mathrm{C})\times T(4)$ で表される．

超平面の代数的性質を特徴づける上で重要なのは，その面の安定群という概念である．Minkowski 時空内のある超平面を不変に保つような Poincaré 変換の全体は Poincaré 群の部分群をつくるが，この部分群をその超平面の**安定群**(sta-

bility group)という．たとえば $x^0=0$ の面を取ると，それは空間回転および空間推進に関して不変で，この面の安定群は J_i と P_i とによって生成される $SU(2)\times T(3)$ である．

つぎに，Poincaré 変換によって互いに移り変われる2つの超平面SとS′を考える．Sの安定群を G，SをS′へ移すPoincaré 変換に対応するユニタリー演算子を U とすると，S′の安定群 G' は

$$G' = UGU^{-1} \tag{11.2.3}$$

で与えられる．つまり，Poincaré 変換で移り変われる2つの超平面の安定群はユニタリー同等である．したがって安定群の考察には，時空内の1点(たとえば原点)を通る超平面を考えれば十分である．

Minkowski 時空の原点を通る超平面は，Lorentz 変換で互いに移り変われるものを1つにまとめると，つぎの3つのクラスに分けることができる(図11.1)．第1のクラス C_S の要素は光円錐の外側にあって，原点だけを光円錐と共有する．これはすでにのべた空間的超平面にほかならない．第2のクラス C_L は光円錐に1つの母線で接する超平面の全体からなり，(超平面の中に光的方向のベクトルが含まれているという意味で)これらの面を**光的超平面**(null plane)と呼ぶことにしよう．第3のクラス C_T の要素は原点を通り，光円錐を2つに分割するものである．(*11.2.3*)によって，同じクラスに属する面の安定群はすべてユニタリー同等だから，安定群の代数的構造は各クラスごとに決まる．

まず C_S の代表として $x^0=0$ の面を取ると，先にのべたように $SU(2)\times T(3)$

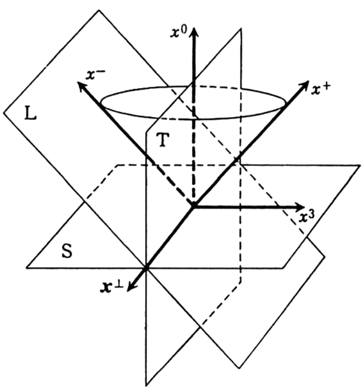


図11.1 Minkowski 時空での3種の超平面．S, L, T はそれぞれ C_S, C_L, C_T を代表する．

という安定群が得られる．また C_T の代表として $x^3=0$ の面を取ると，この面を不変に保つ変換の生成子は J_3, K_r と $P_0, P_r\ (r=1,2)$ である．C_T に属する超平面を後で考えることはないので，結果だけを述べることにすると，その安定群は $SL(2,\mathrm{R})\times T_+(3)$ という構造を持つ．T に対する添字のプラスは，運動量の1つである P_0 が負の固有値を持たないことを表している．P_0 と P_3 の役割が入れかわることに注意しよう．

最後に C_L の代表として $x^+=0$ の面を考えよう．ただし

$$x^{\pm}\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}(x^0\pm x^3) \qquad (11.2.4)$$

である．3軸まわりの回転(生成子は J_3)と x^-, x^r 方向 $(r=1,2)$ の空間推進(生成子は P_-, P_r)に対して，$x^+=0$ の面が不変なことはすぐにわかる．ここで

$$P_{\pm}\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}(P_0\pm P_3) \qquad (11.2.5)$$

で，どちらも(質量0の粒子が存在しない限り)真空以外の状態では正の固有値しか持たない．

また3軸方向のブースト (K_3) は x^+ と x^- の伸縮(dilatation)をひき起こすが，$x^+=0$ の面全体としてはやはり不変である．つぎに

$$F_1\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}(K_1+J_2), \qquad F_2\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}(K_2-J_1) \qquad (11.2.6)$$

を定義すると，(*11.2.1*)によって両者は可換である．$\exp(i\beta_r F_r)$ は $x^+=0$ の面上の点に対して

$$\left.\begin{aligned} x^- &\longrightarrow x^-+\beta_r x^r \\ x^r &\longrightarrow x^r \end{aligned}\right\} \qquad (11.2.7)$$

という変換をひき起こすから，$x^+=0$ の面全体はこの変換のもとで不変である．

F_r と P_μ との交換関係は，(*11.2.2*)により

$$\left.\begin{aligned} [F_r, P_+] &= iP_r \\ [F_r, P_-] &= 0 \\ [F_r, P_s] &= i\delta_{rs}P_- \end{aligned}\right\} \qquad (11.2.8)$$

で与えられる．ところで，K_3 は(*11.2.1b*)によって J_3 とは可換だが，F_r とは可換でない：

$$[K_3, F_r] = -iF_r. \qquad (11.2.9)$$

しかし，F_r が P_- と可換で，P_- は真空を除くと正の固有値を持つから，

$$E_r \equiv F_r/P_- \qquad (11.2.10)$$

とおくと，

$$[K_3, E_r] = [K_3, F_r]\frac{1}{P_-}+F_r\left[K_3, \frac{1}{P_-}\right]$$
$$= -iF_r\frac{1}{P_-}+F_r\frac{i}{P_-} = 0 \qquad (11.2.11)$$

が得られる．つまり，K_3 は J_3 および E_r と可換である．E_r の重要な性質として，$[E_r, P_s]=i\delta_{rs}$ をつけ加えておく．

J_3 と E_r とは

$$\left.\begin{aligned}&[J_3, E_1] = iE_2, \qquad [J_3, E_2] = -iE_1\\&[E_1, E_2] = 0\end{aligned}\right\} \qquad (11.2.12)$$

を満たすから，2次元 Euclid 群 $E(2)$ を生成する．また K_3 は，$x^+=0$ の面上で x^- 方向の伸縮をひき起こす．両者の変換は可換だから，これを $E(2)\otimes D$ で表す．結局 $x^+=0$ の面の安定群は $\{E(2)\otimes D\}\times T_+(3)$ という構造を持つことがわかった．C_S, C_T の安定群が6個の生成子を持つのに対し，C_L の場合には7個になっていることに注意する．

各クラスに属する超平面の性質の違いを，今度はもっと物理的な面から考えてみよう．古典論において，系の初期条件を与えるべき面としてつねに空間的超平面が選ばれるのは，面上でどのような2点を取っても，その間に物理的信号を送ることはできないという因果的独立性に基づいている．C_L あるいは C_T に属する超平面上では，このような独立性が存在しないことは明らかである．

この因果的独立性を，もう少し弱い条件で置きかえることはできないだろうか？　そういうものとして，因果的順序づけが可能という条件を考えてみよう．まず空間的超平面 $x^0=0$ を取って，この面を現在，$x^0>0$ を未来，$x^0<0$ を過去と呼ぶことにすると，物理的信号が過去→現在→未来の逆の方向には決して伝わらないことは明らかだろう．このような順序づけは，C_T に属する超平面では不可能だが，C_L に属する超平面なら可能である．

因果的順序づけが可能という条件のもとで，光的面上での量子化という可能性

が浮かび上ってきたが，この量子化は1949年にDiracが提唱したものにほかならない．Heisenberg-Pauliの量子化との重要な違いは，面上の各点が因果的に独立とは限らないことである．次の小節ではスカラー場を例にとって光的面上での正準形式を議論するが，光的面上での初期条件は任意に与えることができず，理論が要求するある拘束を満たさなければならないことを前もって述べておきたい．前節で述べた拘束のある系に対する一般正準理論の適用がどうしても必要となるのは，このためである．結局問題は，一般正準理論によって，光的面上での場の正準量子化が矛盾なく行えるかどうかに帰着する．

b）中性スカラー場に対する光的正準形式

はじめに，これからよく使う記号を説明しておく．4次元ベクトル a^μ を

$$a^\mu = (a^+, a^-, a^1, a^2)$$

で表したとき，計量テンソル $g^{\mu\nu}$ のうち0でない成分は

$$g^{+-} = g^{-+} = -g^{11} = -g^{22} \qquad (11.2.13)$$

で与えられる．したがって，ベクトルの内積は

$$\begin{aligned} a\cdot b &= a_+b^+ + a_-b^- + a_1b^1 + a_2b^2 \\ &= a_+b_- + a_-b_+ - a_1b_1 - a_2b_2 \end{aligned} \qquad (11.2.14)$$

となる．また時間の役割をする座標としては，つねに x^+ $(\equiv\tau)$ を取ることにする．それに対応して，時間推進の生成子は P_+ $(=P^-)$ で与えられる．

場の一番簡単な例として中性スカラー場 $\varphi(x)$ を取り，そのLagrange密度を

$$\begin{aligned} L(x) &= \frac{1}{2}\partial_\mu\varphi\partial^\mu\varphi - \frac{1}{2}m^2\varphi^2 - V(\varphi) \\ &= \partial_+\varphi\partial_-\varphi - \frac{1}{2}\partial_r\varphi\partial_r\varphi - \frac{1}{2}m^2\varphi^2 - V(\varphi) \end{aligned} \qquad (11.2.15)$$

とする．ただし，$\partial_\mu \equiv \partial/\partial x^\mu$ で，質量 m は0でないとする．また V は非微分型相互作用項を表す．前小節での議論を補う意味で，上のLagrange密度から決まる10個のPoincaré生成子を求めておこう．

まず

$$\begin{aligned} T^{\mu\nu}(x) &\equiv \frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu\varphi)}\partial^\nu\varphi - g^{\mu\nu}L \\ &= \partial^\mu\varphi\partial^\nu\varphi - g^{\mu\nu}L \end{aligned} \qquad (11.2.16)$$

で与えられるエネルギー・運動量密度は，Euler 方程式によって

$$\partial_\mu T^{\mu\nu}=0 \tag{11.2.17}$$

を満たす．簡単のため，

$$d\vec{x}=dx^- dx^1 dx^2=d^4x\delta(x^+-\tau)$$

と書くことにすると，エネルギー・運動量 P_ν は

$$P_\nu=\int d\vec{x}\,T_{-\nu}=\int d\vec{x}\{\partial_-\varphi\partial_\nu\varphi-g_{-\nu}L\} \tag{11.2.18}$$

で与えられ，P_ν は τ によらない．上式をわかりやすく書くと，

$$P_+=\int d\vec{x}\left\{\frac{1}{2}(\partial_r\varphi)^2+\frac{1}{2}m^2\varphi^2+V(\varphi)\right\} \tag{11.2.19a}$$

$$P_-=\int d\vec{x}\,(\partial_-\varphi)^2 \tag{11.2.19b}$$

$$P_r=\int d\vec{x}\partial_-\varphi\partial_r\varphi \tag{11.2.19c}$$

となり，安定群に属さない P_+ だけが $V(\varphi)$ を陽に含んでいる．(*11.2.19*)から，古典場 $\varphi(x)$ に対するエネルギー・運動量が有限であるためには，$x^+=\tau$ の面上で φ とともに $\partial_-\varphi$, $\partial_\nu\varphi$ が 2 乗積分可能でなければならない．

角運動量密度

$$M^{\lambda\mu\nu}=x^\mu T^{\lambda\nu}-x^\nu T^{\lambda\mu} \tag{11.2.20}$$

も，(*11.2.17*)と，$T^{\mu\nu}$ が対称テンソルであることから

$$\partial_\lambda M^{\lambda\mu\nu}=0 \tag{11.2.21}$$

を満足し，これより角運動量テンソル $M^{\mu\nu}$

$$M^{\mu\nu}=\int d\vec{x}M^{+\mu\nu}=\int d\vec{x}\{x^\mu T^{+\nu}-x^\nu T^{+\mu}\} \tag{11.2.22}$$

が得られる．$\tau=0$ の場合に上式を個別に書くと，

$$J_3\equiv M^{12}=\int d\vec{x}\partial_-\varphi(x^1\partial^2-x^2\partial^1)\varphi \tag{11.2.23a}$$

$$F_r\equiv M^{+r}=-\int d\vec{x}\partial_-\varphi x^r\partial_-\varphi \tag{11.2.23b}$$

$$K_3\equiv -M^{+-}=\int d\vec{x}\partial_-\varphi x^-\partial_-\varphi \tag{11.2.23c}$$

$$G_\tau \equiv M^{-\tau} = \int d\vec{x}\left[\partial_-\varphi x^-\partial^\tau\varphi - x^\tau\left\{\frac{1}{2}(\partial_s\varphi)^2 + \frac{1}{2}m^2\varphi + V\right\}\right] \tag{11.2.23d}$$

となり，安定群に属さないG_τだけがVを陽に含む．このことは，空間的面上での正準形式でも同様である．$x^0=0$の面上では，安定群に属するJ_iとP_iとがカイネマティカルで，そうでないP_0とK_iとがダイナミカルな量になっている．

これ以後とくに断らない限り，つねに$\tau=0$と取ることにし，空間座標を$\vec{x}=(x^-, x^1, x^2)$で表す．$g^{\mu\nu}$が非対角的なために，(11.2.15)で与えられるLがφの時間微分$\partial_+\varphi$について1次であることに注意しよう．その結果，φに正準共役な運動量π

$$\pi(\vec{x}) \equiv \frac{\partial L}{\partial(\partial_+\varphi)} = \partial_-\varphi(\vec{x}) \tag{11.2.24}$$

は，φの時間微分ではなく，その空間微分に等しくなる．したがって，φとπに対するPoisson括弧

$$\left.\begin{aligned}&\{\varphi(\vec{x}), \pi(\vec{y})\} = \delta(\vec{x}-\vec{y})\\ &\{\varphi(\vec{x}), \varphi(\vec{y})\} = \{\pi(\vec{x}), \pi(\vec{y})\} = 0\end{aligned}\right\} \tag{11.2.25}$$

との矛盾をさけるためには，

$$\theta(\vec{x}) \equiv \pi(\vec{x}) - \partial_-\varphi(\vec{x}) \tag{11.2.26}$$

とおいて，$\theta(\vec{x})\approx 0$を(1次的)拘束と考えなければならない．(11.2.25)から

$$\{\theta(\vec{x}), \theta(\vec{y})\} = -2\frac{\partial}{\partial x^-}\delta(\vec{x}-\vec{y}) \tag{11.2.27}$$

を得る．

光的面上の拘束に関する問題は，(11.2.27)がシンギュラーなため，迷路にはいりこみやすい．そのような危険をできるだけさけるため，$\varphi(\vec{x})$を波束で展開することによってこの問題を考えていこう．しかし，光的面上の波束に対してどのような関数空間を選ぶべきかは，よくわかっていない．これから述べることも，1つの試みとして理解していただきたい．

(11.2.19)式の下で述べたことから，波束$f(\vec{x})$として，x^-およびx^rに関してほとんどいたるところ微分可能で，fとともに∂_-fおよび∂_rfが有限なL_2ノルムを持つような関数を考えることにし，そのような関数の全体がつくる線形空

間を Φ で表そう†. [Φ はもちろん L_2 空間の部分空間であるが，L_2 ノルムに関して閉じてはいない．つまり，Φ の要素からなる Cauchy 列 $\{f_n\}$ は，Φ の要素に収束するとは限らない．しかし，Φ に

$$\|f\|_\Phi \equiv \mathrm{Max}\left\{\|f\|_2,\ \frac{1}{m}\|\partial_- f\|_2,\ \frac{1}{m}\|\partial_r f\|_2\right\}$$

で定義される新しいノルムを導入すると，Φ はこのノルムに関して完備なノルム空間となる.]

また，Φ に属する f の x^- 微分 $\partial_- f$ の全体がつくる線形空間を Φ_- で表す. [Φ_- も

$$\|\partial_- f\|_{\Phi_-} \equiv \mathrm{Max}\,\{m\|f\|_2,\ \|\partial_- f\|_2,\ \|\partial_r f\|_2\}$$

で定義されるノルムに関して完備なノルム空間である．Φ と Φ_- に対する新しいノルムのもとでは，∂_- は Φ から Φ_- の上への有界(したがって連続)な1次演算子となる．また ∂_- の逆演算子 $\partial_-{}^{-1}$ が存在し，$\partial_-{}^{-1}$ も有界である.]

Φ に属する f として特に

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int d\vec{k}\,\tilde{f}(\vec{k})\,e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \qquad (11.2.28)$$

という形に表されるものを取り，その全体を $\Phi^{(+)}$，$f^*(\vec{x})$ の全体を $\Phi^{(-)}$ とする．ただし

$$d\vec{k} \equiv \theta(k_-)\,dk_- dk_1 dk_2$$

と約束し，また $\vec{k}\cdot\vec{x}=k_- x^- + k_r x^r$ である．つまり $\Phi^{(+)}$ ($\Phi^{(-)}$) は，x^- 方向について正(負)振動数だけを含むような関数からできている．$\Phi^{(+)}\cap\Phi^{(-)}=0$ だから，$\Phi=\Phi^{(+)}\oplus\Phi^{(-)}$ と表すことができる．$\Phi_-{}^{(\pm)}$ も同様に定義できて，$\Phi_-=\Phi_-{}^{(+)}\oplus\Phi_-{}^{(-)}$ である．今後つねに，$\Phi^{(+)}$ に属する波束を $f, g, \cdots$ で，$\Phi^{(-)}$ に属する波束を $f^*, g^*, \cdots$ で表すことにする．

次にノルム空間 $\Phi^{(+)}$ にスカラー積

$$(g, f) \equiv i\int d\vec{x}\,g^*(\vec{x})\overleftrightarrow{\partial}_- f(\vec{x}) \qquad (11.2.29)$$

を定義する．ここで，$A\overleftrightarrow{\partial}B \equiv A(\partial B)-(\partial A)B$ である．上式の複素共役を取ると，

$$(g, f)^* = (f, g) \qquad (11.2.30)$$

† 次の[ ]の部分はとばして読んでもかまわない．

が得られる．

$\Phi^{(+)}$ と $\Phi^{(-)}$ の中で，スカラー積(*11. 2. 29*)に関する1つの完全規格化直交系 $\{f_\alpha(\vec{x})\}$ と $\{f_\alpha^*(\vec{x})\}$，$(\alpha=1, 2, \cdots)$ を選ぼう．ただし，規格化直交性は

$$(f_\alpha, f_\beta) \equiv i\int d\vec{x} f_\alpha^*(\vec{x}) \overleftrightarrow{\partial}_- f_\beta(\vec{x}) = \delta_{\alpha\beta} \qquad (11.\,2.\,31)$$

で，また $\Phi^{(+)}$ および $\Phi^{(-)}$ に関する完全性の条件は

$$-2i\sum_\alpha \{f_\alpha(\vec{x})\partial_- f_\alpha^*(\vec{y}) - f_\alpha^*(\vec{x})\partial_- f_\alpha(\vec{y})\} = I_\Phi(\vec{x}, \vec{y}) \qquad (11.\,2.\,32)$$

で表現される．上式の右辺の $I_\Phi(\vec{x}-\vec{y})$ は，Φ の上での恒等演算子(を積分演算子と見たとき)の核(kernel)を表す．また，2つの核に対する等号は，対応する演算子が等しいことを意味するものとする．[上式の厳密な意味は，左辺の $\alpha=n$ までの部分和に対応する演算子を $I_{\Phi,n}$ とすると，Φ に属する任意の h に対して $\lim_{n\to\infty}\|I_{\Phi,n}h-h\|_\Phi=0$ となる($I_{\Phi,n}$ が I_Φ に強収束する)ことである.]

(*11. 2. 32*)によって，Φ に属する光的面上でのスカラー場 $\varphi(\vec{x})$ は

$$\varphi(\vec{x}) = \sum_\alpha \{q_\alpha f_\alpha(\vec{x}) + q_\alpha^* f_\alpha^*(\vec{x})\} \qquad (11.\,2.\,33)$$

と展開でき，その展開係数 q_α は(*11. 2. 31*)により

$$q_\alpha = i\int d\vec{x} f_\alpha^*(\vec{x}) \overleftrightarrow{\partial}_- \varphi(\vec{x}) \qquad (11.\,2.\,34)$$

で，また q_α^* は上式の複素共役な表現で与えられる．

なお，$\{\partial_- f_\alpha(\vec{x})\}$ と $\{\delta_- f_\alpha^*(\vec{x})\}$ はそれぞれ $\Phi_-^{(+)}$ と $\Phi_-^{(-)}$ の基本系を与え，また

$$2i\sum_\alpha \{\partial_- f_\alpha(\vec{x}) f_\alpha^*(\vec{y}) - \partial_- f_\alpha^*(\vec{x}) f_\alpha(\vec{y})\} = I_{\Phi_-}(\vec{x}, \vec{y}) \qquad (11.\,2.\,35)$$

である．ここで

$$2i\sum_\alpha \{f_\alpha(\vec{x}) f_\alpha^*(\vec{y}) - f_\alpha^*(\vec{x}) f_\alpha(\vec{y})\} \equiv \partial_-^{-1}(\vec{x}, \vec{y}) \qquad (11.\,2.\,36)$$

とおくと，(*11. 2. 31*)からわかるように，$\partial_-^{-1}(\vec{x}, \vec{y})$ は $\partial_- f$ を f に，$\partial_- f^*$ を f^* に写像する積分演算子の核である．∂_-^{-1} が ∂_- の逆演算子，いいかえると

$$\frac{\partial}{\partial x^-}\partial_-^{-1}(\vec{x}, \vec{y}) = I_{\Phi_-}(\vec{x}, \vec{y})$$

であり，また(*11. 2. 36*)の左辺が $\vec{x}$ と $\vec{y}$ の入れ替えに対して反対称であることから

$$\partial_{-1}{}^{-1}(\vec{x},\vec{y})=\frac{1}{2}\varepsilon(x^{-}-y^{-})\delta(\boldsymbol{x}^{\perp}-\boldsymbol{y}^{\perp}) \tag{11.2.37}$$

と表すのが普通である．しかし，$\partial_{-}{}^{-1}$ は Φ_{-} を Φ に写像する(有界1次)演算子であることを忘れてはならない．

光的面上での拘束の問題がむずかしいもう1つの理由は，正準運動量 $\pi(\vec{x})$ としてどの範囲の関数を考えればよいかがはっきりしないことである．ここでは，$\pi(\vec{x})$ は $\partial_{-}\varphi(\vec{x})$ と同じく Φ_{-} に属するとして話を進める．そうすることによって矛盾が生じないことが後でわかる．

このとき $\pi(\vec{x})$ は(11.2.35)によって

$$\pi(\vec{x})=2i\sum_{\alpha}\{p_{\alpha}\partial_{-}f_{\alpha}(\vec{x})-p_{\alpha}{}^{*}\partial_{-}f_{\alpha}{}^{*}(\vec{x})\} \tag{11.2.38}$$

と展開でき，展開係数 p_{α} は

$$p_{\alpha}=\int d\vec{x}f_{\alpha}{}^{*}(\vec{x})\pi(\vec{x}) \tag{11.2.39}$$

で，また $p_{\alpha}{}^{*}$ は上式の複素共役な表現で与えられる．

$\varphi(\vec{x})$ は Φ に，$\pi(\vec{x})$ は Φ_{-} に属するとしたから，(11.2.25)式右辺の $\delta(\vec{x}-\vec{y})$ は，$I_{\Phi}(\vec{x},\vec{y})$ または $I_{\Phi_{-}}(\vec{y},\vec{x})$ と見直す必要がある．ついでながら，

$$\int dy^{-}I_{\Phi_{-}}(\vec{y},\vec{x})=0$$

に注意しておく．q_{α} と $p_{\beta}{}^{*}$ との Poisson 括弧を求めると，

$$\begin{aligned}\{q_{\alpha},p_{\beta}{}^{*}\}&=i\int d\vec{x}d\vec{y}f_{\alpha}{}^{*}(\vec{x})f_{\beta}(\vec{y})\{\overleftrightarrow{\partial}_{-}\varphi(\vec{x}),\pi(\vec{y})\}\\&=i\int d\vec{x}f_{\alpha}{}^{*}(\vec{x})\overleftrightarrow{\partial}_{-}f_{\beta}(\vec{x})\\&=\delta_{\alpha\beta}\end{aligned} \tag{11.2.40}$$

となる．これ以外の組合せに対する Poisson 括弧もすぐに計算でき，結局 $p_{\alpha}{}^{*}$ が q_{α} の，また p_{α} が $q_{\alpha}{}^{*}$ の正準共役変数であることがわかる．

(11.2.26)で定義された $\theta(\vec{x})$ は Φ_{-} に属するから，

$$\theta(\vec{x})=2i\sum_{\alpha}\{\theta_{\alpha}\partial_{-}f_{\alpha}(\vec{x})-\theta_{\alpha}{}^{*}\partial_{-}f_{\alpha}{}^{*}(\vec{x})\} \tag{11.2.41}$$

と展開でき，(11.2.38)と(11.2.33)とから

$$\theta_\alpha \equiv \int d\vec{x} f_\alpha{}^*(\vec{x})\theta(\vec{x}) = p_\alpha - \frac{q_\alpha}{2i} \qquad (11.2.42)$$

が得られる．これより

$$\{\theta_\alpha, \theta_\beta{}^*\} = \left\{p_\alpha - \frac{q_\alpha}{2i}, p_\beta{}^* + \frac{q_\beta{}^*}{2i}\right\} = i\delta_{\alpha\beta} \qquad (11.2.43)$$

がわかる．上式は直接(*11.2.27*)からも得ることができる．(*11.2.41*)の展開によって拘束 $\theta(\vec{x})\approx 0$ は $\theta_\alpha\approx 0$ と $\theta_\alpha{}^*\approx 0$ $(\alpha=1, 2, \cdots)$ で表されることになったが，取り扱いにくい(*11.2.27*)式を(*11.2.43*)という簡単な式に変換できたところに，波束で展開した利点がある．

大分長くなったが，これで前節でのべた一般正準理論を適用する準備ができた．系のハミルトニアンは(*11.1.7*)より

$$P_+ = \int d\vec{x}\left\{\frac{1}{2}(\partial_r\varphi)^2 + \frac{1}{2}m^2\varphi^2 + V(\varphi)\right\} + \sum_\alpha (u_\alpha{}^*\theta_\alpha + u_\alpha\theta_\alpha{}^*) \qquad (11.2.44)$$

で与えられる．拘束 $\theta_\alpha\approx 0$ が任意の時刻で成り立つための条件

$$\frac{d\theta_\alpha}{d\tau} = \{\theta_\alpha, P_+\} \approx 0 \qquad (11.2.45)$$

を(*11.2.43*)を用いて計算すると，

$$u_\alpha \approx i\int d\vec{x} f_\alpha{}^*(\vec{x})\{\partial_r\partial_r\varphi - m^2\varphi - V'(\varphi)\} \qquad (11.2.46)$$

が得られる．同様にして，$\theta_\alpha{}^*\approx 0$ が任意の時刻で成り立つための条件から，$u_\alpha{}^*$ は上式の複素共役な表現で与えられる．

(*11.1.20*)で定義された行列 C は，行と列とを $\theta_1, \theta_1{}^*, \theta_2, \theta_2{}^*, \cdots$ の順に並べると，

$$C = \begin{bmatrix} 0 & i & & & \\ -i & 0 & & & \\ & & 0 & i & \\ & & -i & 0 & \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \qquad (11.2.47)$$

で与えられる．したがってその逆行列 C^{-1} が存在し，

$$C^{-1}=C \tag{11.2.48}$$

である．逆行列の存在から，$\theta_\alpha\approx 0$ と $\theta_\alpha{}^*\approx 0\ (\alpha=1,2,\cdots)$ が第2種拘束の既約な組になっていることがわかる．

$\varphi(\vec{x})$ と $\varphi(\vec{y})$ に対する基本的な Dirac 括弧は，(*11.1.22*)によって

$$\begin{aligned}\{\varphi(\vec{x}),\varphi(\vec{y})\}_{\mathrm{D}}&=\{\varphi(\vec{x}),\varphi(\vec{y})\}+i\sum_{\gamma}\{\varphi(\vec{x}),\theta_\gamma{}^*\}\{\theta_\gamma,\varphi(\vec{y})\}\\&\quad-i\sum_{\gamma}\{\varphi(\vec{x}),\theta_\gamma\}\{\theta_\gamma{}^*,\varphi(\vec{y})\}\\&=i\sum_{\alpha,\beta}\sum_{\gamma}\{q_\alpha,p_\gamma{}^*\}\{p_\gamma,q_\beta{}^*\}f_\alpha(\vec{x})f_\beta{}^*(\vec{y})\\&\quad-i\sum_{\alpha,\beta}\sum_{\gamma}\{q_\alpha{}^*,p_\gamma\}\{p_\gamma{}^*,q_\beta\}f_\alpha{}^*(\vec{x})f_\beta(\vec{y})\\&=-i\sum_{\alpha}\{f_\alpha(\vec{x})f_\alpha{}^*(\vec{y})-f_\alpha{}^*(\vec{x})f_\alpha(\vec{y})\}\\&=-\frac{1}{2}\partial_-{}^{-1}(\vec{x},\vec{y})\end{aligned}$$

となる．ここで(*11.2.36*)を用いた．(*11.2.37*)によって，上の結果を通常

$$\{\varphi(\vec{x}),\varphi(\vec{y})\}_{\mathrm{D}}=-\frac{1}{4}\varepsilon(x^--y^-)\delta(\boldsymbol{x}^\perp-\boldsymbol{y}^\perp) \tag{11.2.49}$$

と書く．なお，上の導出から

$$\{q_\alpha,q_\beta{}^*\}_{\mathrm{D}}=-i\delta_{\alpha\beta} \tag{11.2.50}$$

が得られることは簡単にわかるだろう．

Dirac 括弧に移った後では，既約な第2種の拘束は $=0$ とおけるから，$\theta_\alpha=\theta_\alpha{}^*=0$，つまり $\theta(\vec{x})=0$ で，

$$\pi(\vec{x})=\partial_-\varphi(\vec{x}) \tag{11.2.51}$$

が成り立つ．光的面上では，正準独立な場は $\varphi(\vec{x})$ だけで与えられるのである．空間的面上での正準独立な場が $\varphi(\boldsymbol{x})$ と $\pi(\boldsymbol{x})=\dot{\varphi}(\boldsymbol{x})$ であることと較べると，独立な場の数が半分になっている．これはスカラー場に限ったことではなく，スピン 1/2 の Dirac 場でも事情は同じで，光的正準形式の大きな特徴の1つになっている．

(*11.1.25*)の置き換えによって量子論へ移行すると，(*11.2.49*)は

$$[\varphi(\vec{x}),\varphi(\vec{y})]=-\frac{i\hbar}{4}\varepsilon(x^--y^-)\delta(\boldsymbol{x}^\perp-\boldsymbol{y}^\perp) \tag{11.2.52}$$

に移る．因果的独立性が成り立っている空間的面上では $\varphi(\boldsymbol{x})$ と $\varphi(\boldsymbol{y})$ とはつねに可換であったが，光的面上では φ だけが正準独立なのだから，$\varphi(\vec{x})$ と $\varphi(\vec{y})$ とがつねに可換ということはあり得ない．しかし上式右辺の因子 $\delta(\boldsymbol{x}^{\perp}-\boldsymbol{y}^{\perp})$ は，空間的に離れた2点間では非可換性が消えることを示している．もしそうでなければ，微視的因果律と矛盾することになる．

なお，(11.2.50)は量子論では

$$[q_\alpha, q_\beta{}^\dagger] = \hbar\delta_{\alpha\beta} \tag{11.2.53}$$

という消滅・生成演算子と同じ交換関係に移ることを注意しておく．

c) 生成・消滅演算子と Fock 空間

q_α が消滅演算子と解釈できることを予期して，それを改めて a_α で表すと，$\varphi(\vec{x})$ の量子論での展開は

$$\varphi(\vec{x}) = \sum_\alpha \{a_\alpha f_\alpha(\vec{x}) + a_\alpha{}^\dagger f_\alpha{}^*(\vec{x})\} \tag{11.2.54}$$

と書ける．a_α の項と $a_\alpha{}^\dagger$ の項とが分離できるのは，運動量 P_- の固有値が負の値を取らないためであった．以下では $\hbar=1$ という単位を取ることにすると，φ 同士の正準交換関係(11.2.52)は，a と $a^\dagger$ によって

$$\left.\begin{aligned}&[a_\alpha, a_\beta{}^\dagger] = \delta_{\alpha\beta}\\&[a_\alpha, a_\beta] = [a_\alpha{}^\dagger, a_\beta{}^\dagger] = 0\end{aligned}\right\} \tag{11.2.55}$$

というなじみ深い形に表現できる．

$\varphi(\vec{x})$ が a の項と $a^\dagger$ の項とに分離できることから，その積に対して Wick 積が定義できる．**Wick 積**とは，普通の積で a が $a^\dagger$ の左に来ている項があれば，a が $a^\dagger$ の右に来るように並べかえることによって得られるものである．(Fermi 統計に従う場の場合には，並べかえに応じて適当に符号を変える必要がある.) Poincaré 生成子に対する(11.2.19)と(11.2.23)の量子論的表現では，被積分演算子の積はつねに Wick 積を取ることに約束する．

運動量 $P_-, \boldsymbol{P}_\perp$ を a と $a^\dagger$ で表現する際，$\tilde{f}_\alpha(\vec{k})$ のかわりに

$$\tilde{f}_\alpha(\vec{k}) \equiv \frac{\tilde{h}_\alpha(\vec{k})}{2k_-} \tag{11.2.56}$$

で定義される $\tilde{h}_\alpha(\vec{k})$ を用いると便利である．(11.2.31)によって，$\tilde{h}_\alpha(\vec{k})$ は

$$\int \frac{d\vec{k}}{2k_-}\tilde{h}_\alpha{}^*(\vec{k})\,\tilde{h}_\beta(\vec{k}) = \delta_{\alpha\beta} \tag{11.2.57}$$

という直交関係を満たす．いま

$$(k_-)_{\alpha\beta} \equiv \int \frac{d\vec{k}}{2k_-} \tilde{h}_\alpha{}^* k_- \tilde{h}_\beta \qquad (11.2.58a)$$

$$(\boldsymbol{k}_\perp)_{\alpha\beta} \equiv \int \frac{d\vec{k}}{2k_-} \tilde{h}_\alpha{}^* \boldsymbol{k}_\perp \tilde{h}_\beta \qquad (11.2.58b)$$

とすると，P_- と $\boldsymbol{P}_\perp$ はそれぞれ

$$P_- = \sum_{\alpha,\beta} (k_-)_{\alpha\beta} a_\alpha{}^\dagger a_\beta \qquad (11.2.59a)$$

$$\boldsymbol{P}_\perp = \sum_{\alpha,\beta} (\boldsymbol{k}_\perp)_{\alpha\beta} a_\alpha{}^\dagger a_\beta \qquad (11.2.59b)$$

で与えられる．(*11.2.59a*)により，すべての c_α が 0 でない限り

$$\sum_{\alpha,\beta} (k_-)_{\alpha\beta} c_\alpha{}^* c_\beta > 0$$

となるから，$(k_-)_{\alpha\beta}$ は正定値な Hermite 行列である．

(*11.2.55*)を用いると，簡単な計算で

$$[P_-, a_\alpha] = -\sum_\beta (k_-)_{\alpha\beta} a_\beta \qquad (11.2.60)$$

を導くことができる．系の物理的真空を $|0\rangle$ で表すと，上式と $P_-|0\rangle=0$ とから

$$P_- a_\alpha |0\rangle = -\sum_\beta (k_-)_{\alpha\beta} a_\beta |0\rangle$$

が得られる．P_- の固有値が負の値を取れないことと，行列$(-k_-)$が負定値なこととが両立するためには，すべての α に対して

$$a_\alpha |0\rangle = 0 \qquad (11.2.61)$$

でなければならない．これによって，a を消滅，$a^\dagger$ を生成演算子と解釈できることがわかる．

ダイナミカルな量である P_+ の $a, a^\dagger$ による表現は，当然のことながらずっと複雑である．φ^4 型の相互作用であれば，P_+ は $a^\dagger a^\dagger aa, a^\dagger a^\dagger a^\dagger a, a^\dagger aaa$ という項をも含む．しかし，P_- との可換性から，$a^\dagger \cdots a^\dagger$ や $a \cdots a$ という形の項は許されない．このことは，$a(a^\dagger)$ が P_- の固有値を必ず減少(増大)させることを考えれば，すぐに理解できるだろう．要するに，P_+ に対する表現の右端にはつねに a が，左端にはつねに $a^\dagger$ が来なければならない．したがって，

$$P_+ |0\rangle = 0 \qquad (11.2.62)$$

が成り立つ．物理的真空以外の状態に対しては，質量 0 の粒子が存在しない限り

$$P^2 \equiv 2P_+P_- - \boldsymbol{P}_\perp{}^2 > 0$$

であるから，このことと $P_->0$ とから $P_+>0$ がわかる．つまり，物理的真空 $|0\rangle$ はエネルギー最低の状態である．

光的面上で興味がある物理量の別の例として，

$$N \equiv \sum_\alpha a_\alpha{}^\dagger a_\alpha \tag{11.2.63}$$

で定義される量をあげておく．相互作用がある限り N は P_+ と可換でないから，保存量ではない．N は G_1, G_2 とも非可換だが，残る7個のカイネマティカルな生成子とは可換である．この N のように，保存量ではないが，安定群と可換な物理量は，光的面上での量子論で重要な役割をする．Dirac 場の理論に現れる非保存な光的アクシャル荷電もその例である．

(*11. 2. 61*)において，$|0\rangle$ が物理的真空を表すことは重要な点である．このことは，空間的量子化には見られなかった，光的量子化に特有の性質である．ここで，“有限自由度の系に対する正準交換関係の表現は，ユニタリー同等性を除いて一意的である”という von Neumann の定理が，場の理論では成り立たないことに注意しよう．実際，場の理論ではユニタリー同等でない表現が連続無限個存在することが知られている(本講座第4巻『量子力学II』§18.3を参照されたい)．

スカラー場を Heisenberg-Pauli の方法で量子化すると，正準交換関係は

$$[a(\boldsymbol{k}), a^\dagger(\boldsymbol{k}')] = \delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \tag{11.2.64}$$

で与えられ，消滅演算子 $a(\boldsymbol{k})$ は自由な真空 $|0_{\rm free}\rangle$ を消す：

$$a(\boldsymbol{k})|0_{\rm free}\rangle = 0. \tag{11.2.65}$$

したがって，$|0_{\rm free}\rangle$ に任意個の $a^\dagger$ を演算したものの1次結合の全体から，完備化によって，Fock 空間と呼ばれる1つの Hilbert 空間を構成することができる．この空間の上での $a, a^\dagger$ の表現を Fock 表現という．自由場の理論なら，これで表現が決まったわけである．

相互作用がある場合に問題となるのは，物理的 Hilbert 空間の上で $a, a^\dagger$ が Fock 表現を取るかどうかという点である．ところで，自由な真空 $|0_{\rm free}\rangle$ は，Fock 空間の中で $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{0}$ で，ノルムが有限な唯一の状態である．したがって，もしも物理的真空 $|0\rangle$ が Fock 空間に属するなら，それは $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{0}$ でノルムが有限な状態だから，

$$|0\rangle = |0_{\rm free}\rangle \tag{11.2.66}$$

でなければならない．真空偏極が起こる理論では上の等式は成り立たないから，そのような理論での物理的真空は Fock 空間に属し得ない．このことは Heisenberg-Pauli の量子化にあてはまる．いいかえると，この量子化では $a, a^\dagger$ に対して Fock 表現とはユニタリー同等でない表現を取らなければならない(R. Haag, 1955)．空間的量子化は物理的に一番わかりやすいものではあるが，そのかわり Fock 空間という量子論での有用な概念を失うことになる．

一方，光的量子化では，P_- の保存によって，相互作用があっても真空偏極は起こり得ない．この量子化では $|0_{\rm free}\rangle$ と $|0\rangle$ との区別がないのである．したがって，$|0\rangle$ に任意個の $a^\dagger$ を演算したものの1次結合の全体から完備化によってつくられる Fock 空間が，相互作用系に対する物理的 Hilbert 空間を与える．$a, a^\dagger$ を消滅・生成演算子と解釈できる理由は，(*11. 2. 55*) という交換関係とともに，それらが物理的 Fock 表現(物理的 Hilbert 空間の上での Fock 表現)を取るという点にある．

2つの量子化の共通点，相異点をのべてきたが，光的面上での量子化が矛盾を含まないかどうかをみるには，いろいろな点についてもっとよく調べる必要がある．この問題をくわしく議論することはできないが，通常の量子化との関係について簡単にふれておきたい．量子電気力学において，光的正準形式から出発して摂動論的に散乱行列をつくったとき，それが摂動のすべての次数で Feynman-Dyson の結果と一致することがわかっている．しかし，ユニタリー同等でない2つの正準形式が，どんな理論に対してもつねに同じ結果を与えるかどうかは自明のことではない．摂動論的な散乱行列は意味がないと考えられている非可換ゲージ場の理論(Yang-Mills 理論)では，結果が量子化の仕方によらないということは，時空の次元を2にとる簡単な場合でもまだ確かめられていない．

量子電気力学に光的量子化を適用しても，それによってとくに新しいことがわかるわけではない．摂動論が使えるような場の理論では，多分この事情は変わらないだろう．この量子化が有効だったのは，今のところハドロンに対する弦模型や，上にふれた2次元 Yang-Mills 理論など限られた例しかないが，どちらの理論でも，物理的な粒子(ハドロン)が単なる素粒子ではない点は興味がある．それはともかく，光的量子化の大きな難点は，理論の Poincaré 共変性が明白な形で表せないことである．たとえば，スピンやパリティのような状態の分類に重要な

概念がダイナミカルな量になってしまう．したがって，光的面上での量を考える際にも，可能な限り共変的アプローチを併用することが望ましい．

文献・参考書

まずはじめに量子力学全般についての文献・参考書を掲げ，以下各部あるいは章ごとに掲げることにする．ただし，第1～3章については，とりたてて文献・参考書をあげることをしないが，これについては全般についての文献・参考書を見ていただきたい．

全般についての文献・参考書

量子力学の歴史的発展を追体験するには，それぞれの段階における原論文あるいは原著書を味読するにこしたことはない．ただその量は膨大であり，中には入手困難なものもある．幸い次に掲げる邦訳の叢書や選書は重要なものをほとんど含んでいるから，関心のある読者はそれらを参照されたい．

(1) 物理学史研究刊行会編:『物理学古典論文叢書』，全12巻，東海大学出版会(1969～1971)

(2) 湯川秀樹監修:『アインシュタイン選集』，第1巻，共立出版(1971)

(3) 田中正，南政次訳:『シュレーディンガー選集』，第1巻，共立出版(1974)

(4) 湯川秀樹，井上健編:『現代の科学 II』(世界の名著，第66巻)，中央公論社(1970)

(5) 林一編訳:『アインシュタインとの論争』，東京図書(1969)

なお今日出版されている量子力学の教科書，参考書は内外を通じその数が極めて多い．ここでは国の内外で標準的とされているいくつかの著書をあげるにとどめる．

(6) Bohm, D: *Quantum Theory*, Prentice-Hall(1951)(高林武彦ほか訳:『量子論』，みすず書房(1964))

(7) 朝永振一郎:『量子力学 I，II』(Iのみ第2版(1969))，みすず書房(1952)(英訳: *Quantum Mechanics*, vols. 1-2, Elsevier/North-Holland(1962))

(8) Dirac, P. A. M.: *The Principles of Quantum Mechanics* (4th ed.), Oxford Univ. Press (1958) (朝永振一郎ほか訳:『量子力学(原書第4版)』, 岩波書店(1968))

(9) Messiah, A.: *Mécanique Quantique*, Dunod (1959) (小出昭一郎ほか訳:『量子力学 1, 2, 3』, 東京図書(1971, 1972, 1972))

(10) Ландау, Л. Д. и Лифшиц, Е. М.: *Квантовая механика——нерелятивистская теория* (изд. 2-е), Наука (1963) (好村滋洋ほか訳:『量子力学——非相対論的理論 1, 2』(ランダウ・リフシッツ理論物理学教程), 東京図書(1967, 1970))

(11) Schiff, L. I.: *Quantum Mechanics* (3rd ed.), McGraw-Hill (1968) (井上健訳:『量子力学, 上・下』, 吉岡書店(1970, 1972))

第 II 部

第 4 章

量子力学の基礎体系を深く勉強するには, 上掲の(8)を吟味するのがよかろう. あわせて, その物理的背景を

(12) Heisenberg, W.: *Die Physikalische Prinzipien der Quantenmechanik*, Hirzel (1930) (玉木英彦ほか訳:『量子論の物理的基礎』, みすず書房(1954))

などで確かめておくとよい.

第 III 部

第 5~7 章

典型的な状態の構造にせよ近似法にせよ, その種々の側面に自ら手を動かして迫ることなしには, 十分の学習はできない. 次の本は, その手引きとなり, 同時に本書に欠けている事柄を補うのに役立つだろう.

(13) 小谷正雄, 梅沢博臣編:『大学演習 量子力学』, 裳華房(1959)

各論的な参考書をいくつかあげておこう．角運動量の量子力学について

(14) Wigner, E. P.: *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik*, Vieweg (1931) (森田正人ほか訳:『群論と量子力学』, 吉岡書店 (1971))

は古典に属する．計算法を学ぶのには

(15) Edmonds, A. R.: *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton Univ. Press (1968)

がよい．後にあげる(29)には便利な公式集がある．

電子のスピンについては

(16) 朝永振一郎:『スピンはめぐる——成熟期の量子力学』(自然選書)，中央公論社(1974); みすず書房(2008)

が，その発見から場の理論による位置づけまでの歴史を興味ふかく叙述している．

時間反転については，次の論文が味わい深い．

(17) Watanabe, S: *Rev. Mod. Phys.* **27**, 26, 40, 179 (1955)

束縛状態に関する§5. 4 c) の議論の前半は

(18) Ezawa, H., Nakamura, K. & Yamamoto, Y.: *Proc. Japan Acad.*, **46**, 168 (1970)

による．後半の束縛状態の数の評価式は

(19) Bargmann, V.: *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **38**, 961 (1952)

のものである．この種の評価式について

(20) Wightman, A. S. *et al.* ed.: *Studies in Mathematical Physics*, Princeton Univ. Press (1977)

に B. Simon の総説があるので参照されたい．

散乱問題に関しては，井戸型ポテンシャルの例で S 行列の極を詳しく調べた

(21) Nussenzweig, H. M.: *Nucl. Phys.* **11**, 499 (1959)

を参照．図5. 24の説明に Levinson の定理を引用しながら証明を割愛したが，原論文は

(22) Levinson, N.: *Kgl. Danske Videnskab Selskab Mat.-fys. Medd.*, **25**, 9 (1949)

この定理を用いて与えられたポテンシャルのもつ束縛状態の数をもとめる

(23) Shey, H. M. & Schwarz, J. L.: *Phys. Rev.*, **B139**, 1428(1967)

も参照．散乱問題は『量子力学II』で詳しく扱われる．ここでは入門的な参考書を3つだけあげておこう．

(24) 砂川重信：『散乱の量子論』(岩波全書)，岩波書店(1977)

(25) Taylor, J. R.: *Scattering Theory——The Quantum Theory of Non-Relativistic Collisions*, Wiley(1972)

(26) Newton, R. G.: *Scattering Theory of Waves and Particles*, McGraw-Hill(1966)

原子・分子の問題については，この講座には，そのための巻が特にないから，ここで参考書をあげておこう．

(27) 水島三一郎，長倉三郎：『改稿 量子化学』(岩波全書)，岩波書店(1959)

(28) Bethe, H. & Salpeter, E.: *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Problems*, in *Hdb. d. Phys.*, Bd. XXXV, Springer-Verlag(1957)

(29) Собельман, И. И.: *Введение в теорию атомных спектров*, Физматгиз(1963) (英訳: *Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, Pergamon(1972))

(30) Slater, J. C.: *Quantum Theory of Atomic Structure* I, II, McGraw-Hill(1960)

(31) Slater, J. C.: *Quantum Theory of Molecules and Solids* I, McGraw-Hill(1963)

§5.7に引用したHeの基底準位の変分計算は

(32) Kinoshita, T.: *Phys. Rev.*, **105**, 1490(1957)

(33) Pekeris, C. L.: *Phys. Rev.*, **112**, 1649(1958)

表5.6に記したH^-の基底準位の'実験値'は，そこでも述べたとおり実は(33)の計算値である．この節のd)項に述べた位置の相関の考察は(31)に示唆されている．

なお，木下の用いたRydberg定数(本文p.317)は

(34) Cohen, E. R. & DuMond, J. W. M.: *The Fundamental Atomic Constants*, in *Hdb. d. Phys.*, Bd. XXXV, Springer-Verlag(1957)

が決定したもの．電子の電荷と質量のp.311に引用した値は

(35) Particle Data Group: *Rev. Mod. Phys.*, **48**, S1(1976)

による．この両者の物理定数の体系を比較してみるとおもしろい．物理定数決定の精度は年を追って向上している．

分子における角運動量状態の扱い方について

(36) Judd, B. R.: *Angular Momentum for Diatomic Molecules*, Academic Press(1975)

があることを付言しておこう．

摂動論や変分法などの近似法については

(37) 寺沢寛一編:『自然科学者のための数学概論，応用編』，岩波書店(1960)

(38) 宮武修，加藤祐輔:『固有値問題』(数学選書)，槇書店(1971)

などを参照されたい．本格的な参考書は

(39) Kato, T.: *Perturbation Theory for Linear Operators* (2nd ed.), Springer-Verlag(1976)

ここで，摂動論がまちがった答をあたえる興味ふかい例として

(40) Wigner, E. P.: *Phys. Rev.*, **94**, 77(1954)

をあげておく．くりこみ群の見地からの

(41) Wilson, K. G.: *Advances in Math.*, **16**, 170(1975)

の注意も参照．

Padé 近似に対しては，まだ十分な理論はないが

(42) Baker, G. A. & Gammel, J. L.: *Padé Approximants in Theoretical Physics*, Academic Press(1970)

(43) Baker, G. A.: *Essentials of Padé Approximants*, Academic Press (1975)

から勉強をはじめていただくとよい．この近似法が非調和振動子の場合に収束して正しい答を与えることを証明したのは

(44) Simon, B.: *Ann. of Phys.* (*N. Y.*), **58**, 76(1970)

時間発展をきめる摂動論は

(45) Ezawa, H.: *Proc. of Eastern US Theoretical Physics Conference* 1963, Univ. of North Carolina Press(1963)

の方式を述べた．種々の方式の比較論が

(46) Langhoff, P. W., Epstein, S. T. & Karplus, M.: *Rev. Mod. Phys.*, **44**, 602 (1972)

にある．この時間発展の摂動論を述べたとき，§6.2で証明なしに引用したBrillouin-Wigner の摂動公式については

(47) Kramers, H. A.: *Collected Scientific Papers*, North-Holland (1956)

の p. 929 に収録されている論文 "Remarks on the Perturbation Formulae of Brillouin and Wigner" (Courant Anniversary Volume 1948) を見るとよい．

なお，光の放出吸収など遷移確率の公式の応用例を述べる余裕がなかったので，(9), (10), (11) など適当な教科書で補ってほしい．

Born-Oppenheimer 近似の分子への適用については，原論文

(48) Born, M. & Oppenheimer, J. R.: *Ann. d. Phys.*, **84**, 457 (1927)

を見ていただくのが一番よい．その数学的基礎が

(49) Thirring, W. & Urban, P. ed.: *Schrödinger Equation*, Springer-Verlag (1977)

のなかで J.-M. Combes らにより論ぜられている．この§6.3 b) で触れた Feynman の定理は

(50) Feynman, R. P.: *Phys. Rev.*, **56**, 340, (1939)

が，分子の形成は核と核の間にたまった電子雲の静電引力によるという説明を考えたときに得られたものである．

相対論的な扱いに現れるスピノル算については

(51) Corson, E. M.: *Introduction to Tensors, Spinors and Relativistic Wave Equations*, Hafner (1953)

相対論的な波動方程式の '導出' については

(52) 大貫義郎:『ポアンカレ群と波動方程式』(応用数学叢書)，岩波書店 (1976)

を読んでいただく．Dirac 方程式の物理を学ぶには

(53) Sakurai, J. J.: *Advanced Quantum Mechanics*, Addison-Wesley (1967)
(54) 西島和彦:『相対論的量子力学』(新物理学シリーズ，13)，培風館 (1973)
(55) Bjorken, J. D. & Drell, S. D.: *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill (1965)

(56) Rose, M. E.: *Relativistic Electron Theory*, John-Wiley (1960)

なお，§7.5c) で出会った類の特異なポテンシャルをもつ波動方程式については

(57) Case, K. M.: *Phys. Rev.*, **80**, 797 (1950)

(58) Frank, M., Land, D. J. & Spector, R. J.: *Rev. Mod. Phys.*, **43**, 36 (1971)

を見ていただきたい.

第 8 章

以下に掲げるのは本章で引用ないし参照文献としてあげた論文および著書である．大部分は物理学を学ぶ上では数学的にやや程度が高いように思われるが，読者がさらに進んで厳密な証明あるいは数学的構造を知ろうとされる場合の参考となれば幸いである．この他にも多くのすぐれた著書があろうが，筆者自身が執筆に当って直接多くを負ったものに限定し，そのいくつかについて簡単な解説を付けることにした.

量子力学で重要な Stone の定理を深く知るには次の論文や著書がよい.

(59) Stone, M. H.: *Ann. of Math.*, **33**, 643 (1932)

(60) Yosida, K.: *J. Math. Soc. Japan*, **1**, 15 (1948)

(61) van der Waerden, B. L.: *Group Theory and Quantum Mechanics*, Springer-Verlag (1974)

(62) 吉田耕作，河田敬義，岩村聯:『位相解析の基礎』，岩波書店 (1960)

(63) 吉田耕作:『ヒルベルト空間論』(共立全書)，共立出版 (1971)

このうち (61) は旧版 (1932) を全面的に書きかえたもので量子力学の基礎が簡潔かつ明快に述べられている.

Lie 代数について懇切に書かれたものとして，とくに半単純 Lie 代数の分類を丁寧に解説したものとしては

(64) Jacobson, N.: *Lie Algebras*, Interscience (1962)

群論と量子力学に関して古典的名著として知られるのは前掲 (14) と

(65) Weyl, H.: *Gruppentheorie und Quantenmechanik*, Springer-Verlag (1928) (英訳: *Theory of Groups and Quantum Mechanics*, Princeton Univ. Press (1931) (山内恭彦訳:『群論と量子力学』，裳華房 (1932)，復刻版，現代工学社 (1977))

射線表現の古典としては

(66) Schur, J.: *J. für die Reine und Angewandte Math.*, **127**, 20(1904); **132**, 85(1907)

ただし量子力学に対する応用としては次の論文だけで十分である.

(67) Bargmann, V.: *Ann. of Math.*, **59**, 1(1954)

なお次の著書は群論について包括的かつ網羅的にとりあげ懇切に説明している.

(68) Hamermesh, M.: *Group Theory and its Application to Physical Problems*, Addison-Wesley (1962)

小冊子ながら高度の内容を簡潔に述べた邦書として

(69) 山内恭彦, 杉浦光夫:『連続群論入門』, 培風館(1960)

をすすめる.

応用上の見地から Clebsch-Gordan 係数を詳しく論じた著書としては

(70) Condon, E. U. & Shortley, G. H.: *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge Univ. Press (1935)

が有名である. (70) では Clebsch-Gordan 係数といわず'変換係数'としている. しかしこれに載っている表は少なく, これを補完したものとして

(71) Yamada, K. & Morita, M.: *Prog. Theor. Phys.*, **4**, 444(1952)

がある. また回転群を表現に重点をおき量子力学への応用の立場から書いた

(72) 山内恭彦:『回転群とその表現』, 岩波書店(1958)

は先駆的な意味をもっている.

なお本章の軌道角運動量, Kepler 運動の対称性に関する叙述は次の 2 論文に多くを負っている.

(73) van Winter, C.: *Ann. of Phys.*, **47**, 232(1968)
(74) Toyoda, T. & Ravndal, F.: *Nucl. Phys.*, **B 3**, 312(1967)

最後に物理学者向けの代数学の懇切かつ厳密な解説書として

(75) 彌永昌吉, 杉浦光夫:『応用数学者のための代数学』, 岩波書店(1969)

および Poincaré 群の応用を詳論した前掲(52)をあげておく.

第 IV 部

第 9 章

多粒子系の問題，すなわちいわゆる多体問題の教科書は数多く出版されている．たいていは，いくつかの具体的な問題に力点が置かれていて，その方面の勉強に役立つものが多い．ここでは，比較的一般的に書かれているものをいくつかあげておく．

邦書では

(76) 沢田克郎:『多体問題』，岩波書店(1971)

(77) 西山敏之:『多体問題入門』，共立出版(1975)

などがある．いずれも，この方面の専門家の筆であるだけに優れたものである．どちらかといえば(77)の方が広い範囲の話題を扱っている．(76)は著者の業績の基本である独自の方法で一貫して記述されており，ユニークでありながら丁寧に書かれている．本書でも大いに参考にさせてもらった．

外国のものも数多くあり，それぞれに特徴があるが，

(78) Thouless, D. J.: *The Quantum Mechanics of Many-Body Systems* (2nd ed.), Academic Press(1972)(松原武生訳:『多体系の量子力学』，吉岡書店(1975))

(79) Pines, D.: *The Many-Body Problems*, Benjamin, Inc. (1961)

(80) March, N. H., Young, W. H., & Sampanthar, S.: *The Many-Body Problem in Quantum Machanics*, Cambridge Univ. Press(1967)

をあげておく．なお進んで勉強したい向きは，これらの書にそれぞれの方面の参考書が列挙してある．

多体問題についての文献をあげるとなると紙数がいくらあっても足りないくらいであるので，以下では，本文に関係のある問題についての歴史的な文献をあげるにとどめる．

Fermi 粒子系の波動関数，いわゆる Slater 行列式については

(81) Slater, J. C.: *Phys. Rev.*, **34**, 1293(1929)

の論文がある.

第2量子化についての論文も数多くあるが

(82) Heisenberg, W. u. Pauli, W.: *Z. Physik*, **56**, 1 (1929); **59**, 169 (1930)

で代表させる. Schrödinger 方程式と演算子方程式の同等性については

(83) Jordan, P. u. Klein, O.: *Z. Physik*, **45**, 751 (1927),

(84) Jordan, P. u. Wigner, E. P.: *Z. Physik*, **47**, 631 (1928),

Fock 空間については

(85) Fock, V.: *Z. Physik*, **75**, 622 (1932)

が歴史的な文献である

密度行列については

(86) Dirac, P. A. M.: *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, **26**, 376 (1930)

がその重要性を指摘し,

(87) Löwdin, P.-O.: *Phys. Rev.*, **97**, 1474 (1955)

が一般的に論じている.

Hartree-Fock の方法は

(88) Hartree, D. R.: *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, **24**, 89 (1929)

(89) Fock, V.: *Z. Physik*, **61**, 126 (1930)

(90) Slater, J. C.: *Phys. Rev.*, **35**, 210 (1930)

等に始まる. Hartree の基底状態の安定性を論じたものとして

(91) Sawada, K. & Fukuda, N.: *Prog. Theor. Phys.*, **25**, 653 (1961)

が有名である. 前記(76)にも詳しく述べられている.

Thomas-Fermi の方法は

(92) Thomas, L. H.: *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, **23**, 541 (1927)

(93) Fermi, E.: *Z. Physik*, **48**, 73; **49**, 550 (1928)

が原論文であるが

(94) Feynman, R., Metropolis, F. & Teller, E.: *Phys. Rev.*, **75**, 1561 (1949)

などにより発展させられた. これらの近似法についてはこれらの論文の他に, 量子力学の多くの教科書でも扱われており, 分子・原子の問題への応用についての総合報告も多い.

Fermi 粒子系や Bose 粒子系の基底状態については, 具体的に電子ガスやヘ

リウム流体等を対象として数多くの論文がある．それらはむしろ本講座の他の巻で取扱われるので，文献もそれに譲る．ただ，Bose 粒子系での Bogoliubov 変換に関係する論文

(95) Bogoliubov, N. N.: *J. Phys. USSR*, **11**, 23 (1947)

(96) Bogoliubov, N. N. & Zubarev, D. N.: *Soviet Phys. JETP*, **1**, 83 (1955)

および

(97) Hugenholtz, N. M. & Pines, D.: *Phys. Rev.*, **116**, 489 (1959)

をあげておく．

集団運動についての論文も数多いが，これも具体的な問題に関するものは他に譲り（上記(76)～(80)には個別問題についての論文が引用されている），本書で用いた基準振動の方法についての原著

(98) Sawada, K.: *Phys. Rev.*, **106**, 372 (1957)

をあげておく．

第 10 章

場の量子論に関しては，多くの参考書があるが，まずオーソドックスな古くから知られる教科書をいくつかあげる．

(99) Heitler, W.: *The Quantum Theory of Radiation* (3rd ed.), Oxford Univ. Press (1954) (沢田克郎訳『輻射の量子論，上・下』(物理学叢書)，吉岡書店 (1958)

(100) 湯川秀樹：『素粒子論序説，上』，岩波書店 (1948)

(101) Wentzel, G.: *Quantum Theory of Field*, Interscience (1949)

(102) Jauch, J. M. & Rohrlich, F.: *The Theory of Photons and Electrons*, Addison-Wesley (1955)

(103) Umezawa, H.: *Quantum Field Theory*, North-Holland (1956)

わりあい最近のものとしては

(104) Bogoliubov, N. N. & Shirkov, D. V.: *Introduction to the Theory of Quantized Fields*, Interscience (1959)

(105) Bjorken, J. D. & Drell, S. D.: *Relativistic Quantum Fields*, McGraw-Hill (1965)

(106) Nishijima, K.: *Fields and Particles*, Benjamin (1969)

(107) Берестецкий, В. Б., Лифшич, Е. М. и Питаевский, Л. П.: *Релятивистская квантовая теория*, часть 1, Наука(1968) (井上健男訳:『相対論的量子力学1』(ランダウ・リフシッツ理論物理学教程) 東京図書(1971))

(108) 湯川秀樹, 片山泰久編:『素粒子論』(岩波講座現代物理学の基礎 [初版], 11) 岩波書店(1974)

をあげておく. また入門書とはいえないが, 特色をもった単行書として

(109) 梅沢博臣, 江沢洋, 河原林研:『素粒子論の話題』(核物理学講座, 12) 共立出版(1963)

(110) Bogoliubov, N. N., Logunov, A. A. & Todorov, I. T.: *Introduction to Axiomatic Quantum Field Theory*, Benjamin(1975)

(111) 中西襄:『場の量子論』(新物理学シリーズ, 19), 培風館(1975)

や前掲(52)などがある. (52)と関係して, 高階スピンをもつ場の相対論的波動方程式のくわしい単行書として(51)をあげておく.

そのほか, §10.1で触れたコヒーレント状態については,

(112) 加野泰:『コヒーレンス理論とその応用』(応用数学叢書), 岩波書店(1976)

がくわしい.

つぎに第10章に関係した論文についてみると, まず初期の場の量子論の建設にかかわった重要論文は

(113) 岡林孝郎編:『場の量子論』(新編物理学選集, 17), 日本物理学会(1955)

に, ほぼ収録されている. ここではその中からつぎのものをあげておく.

(114) Dirac, P. A. M.: *Proc. Roy. Soc.* (*London*), **A114**, 243(1927)

(115) Heisenberg, W. u. Pauli, W.: *Z. Physik*, **56**, 1(1929); **59**, 168(1930)

(115)は, 場の量子論の原点と目される基本文献である.

そのほか第10章の叙述の中で, 陽にふれた原論文を以下にあげておく.

コヒーレント状態と古典論との関係で言及したSchrödingerの論文は,

(116) Schrödinger, E.: *Naturwiss.*, **28**, 664(1926)

(117) Jordan, P. u. Klein, O.: *Z. Physik*, **45**, 751(1927)

は, Diracによる(114)の輻射場の量子化と並んで, 物質場の量子化を扱った先駆的な論文である.

(118) Jordan, P.: *Z. Physik*, **44**, 1(1927)

は，離散的固有値をもつ系の正準量子化に対する重要な注意を与えている．

パラ統計に関しては，つぎのものをあげておく．

(119) Green, H. S.: *Phys. Rev.*, **90**, 270(1953)

(120) Ohnuki, Y. & Kamefuchi, S.: *Prog. Theor. Phys.*, **50**, 258(1973)

多時間理論，超多時間理論に関する基本文献は，

(121) Dirac, P. A. M.: *Proc. Roy. Soc.*, **A136**, 453(1932)

(122) Dirac, P. A. M., Fock, V. A. & Podolsky, B.: *Phys. Zeits. U. S. S. R.*, **2**, 468(1932)

(123) Tomonaga, S.: *Prog. Theor. Phys.*, **1**, 27(1946)

(124) Schwinger, J.: *Phys. Rev.*, **74**, 1439(1948)

場の理論の特異性の除去に関連して触れた論文は，

(125) Pauli, W. & Villars, F.: *Rev. Mod. Phys.*, **21**, 434(1949)

(126) Markov, M. A.: *Nucl. Phys.*, **10**, 140(1959)

(127) Pais, A. & Uhlenbeck, G. E.: *Phys. Rev.*, **79**, 145(1950)

である．

第 11 章

Dirac の一般正準理論については

(128) Dirac, P. A. M.: *Can. Journ. Math.*, **2**, 129(1950)

(129) Dirac, P. A. M.: *Lectures on Quantum Mechanics* (Belfer Graduate School of Science), Yeshiva Univ.(1964)

(130) 山内恭彦，内山龍雄，中野董夫：『一般相対性および重力の理論』，裳華房(1967)

(131) Hanson, A. J., Regge, T. & Teitelboim, C.: *Constrained Hamiltonian Systems*, Accademia Nazionale dei Lincei,(to be published)

などがある．(128)が原論文で他は解説であるが，最初に読むものとしては(129)が一番読みやすいだろう．いろいろな応用については，(131)が詳しい．

索　　引

E

F

G

H

I

J

K

R

S

Y

Z

編　集　湯川秀樹
　　　　豊田利幸

執筆分担
第1章　湯川秀樹
第2章　並木美喜雄
第3章　並木美喜雄
第4章　江沢　洋
第5章　江沢　洋
第6章　江沢　洋
第7章　江沢　洋
第8章　豊田利幸
第9章　高木修二
第10章　田中　正
第11章　位田正邦

量子力学 I　新装版 現代物理学の基礎 3

2011年9月27日　第1刷発行

著　者　湯川秀樹（ゆかわひでき）　並木美喜雄（なみきみきお）　江沢　洋（えざわひろし）
　　　　豊田利幸（とよだとしゆき）　高木修二（たかぎしゅうじ）　田中　正（たなかしょう）
　　　　位田正邦（いだまさくに）

発行者　山口昭男

発行所　株式会社 岩波書店
　　　　〒101-8002 東京都千代田区一ツ橋 2-5-5
電　話　案内 03-5210-4000
　　　　http://www.iwanami.co.jp/

印刷・精興社　製本・牧製本

ISBN 978-4-00-029803-2　Printed in Japan